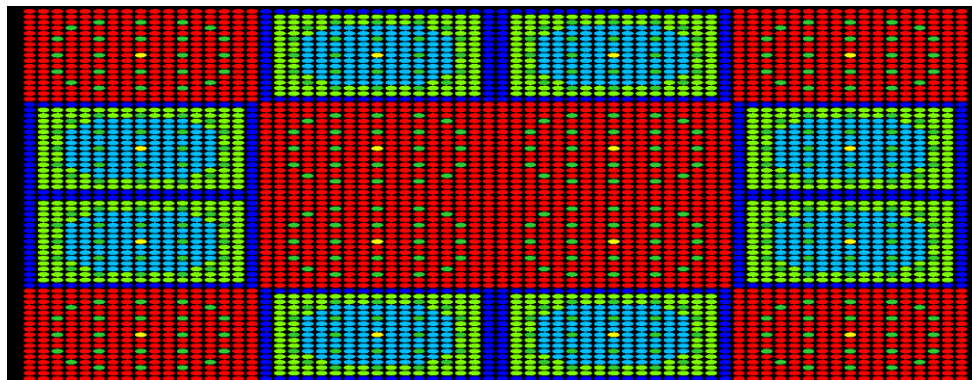


کد سه بعدی ترابرد نوترون به روش مونت کارلو برای محاسبات گروهی بحرانیت



گزارش فنی MCTRAN

بسته هجدهم - ویرایش ۱ - اسفند ۱۳۹۴

ANC-TEC-TEP-CC-200

فهرست

- ۱- چکیده ۲۶
- ۲- کلیدواژه ۲۷
- ۳- اختصارات ۲۸
- ۴- مقدمه ۲۹
- ۵- دامنه گزارش ۳۱
- ۶- هندسه سیستم ۳۱

۳۳ ۱-۶-۱ سطوح پایه

۳۵ ۱-۱-۶-۱ سطح درجهی یک

۳۷ ۱-۶-۲ سطح درجهی دو کروی

۳۹ ۱-۶-۳ سطح درجهی دو استوانه‌ای

۴۱ ۱-۶-۴ سطوح درجهی دو عمومی

۶۵ ۱-۶-۵ بردار نرمال بر سطح در یک نقطه

۶۶ ۱-۶-۲ سلول

۶۸ ۱-۶-۲-۱ سلول‌های ساده

- ۶۹ ۲-۲-۶ سلول های مرکب
- ۷۲ ۳-۲-۶ عملیات سلول یابی
- ۷۶ ۳-۶ احجام هندسی یا سطوح بسته
- ۸۱ ۱-۳-۶ متوازی السطوح با جهت گیری دلخواه
- ۸۳ ۲-۳-۶ مکعب مستطیل با رویه های عمود بر محورهای مختصات
- ۸۵ ۳-۳-۶ استوانه قائم مدور
- ۸۶ ۴-۳-۶ منشور قائم با قاعده شش ضلعی منتظم
- ۹۰ ۴-۶ فاصله جهت دار نوترون از مرز سلول

- ۹۸..... ۵-۶- ردیابی نوترون در سیستم
- ۱۰۴..... ۶-۶- شرایط مرزی سطوح
- ۱۰۶..... ۱-۶-۶- مرز عادی
- ۱۰۷..... ۲-۶-۶- مرز بازتابنده
- ۱۰۸..... ۳-۶-۶- مرز سفید
- ۱۱۰..... ۴-۶-۶- مرز متناوب
- ۱۱۲..... ۷-۶- ساختارهای تکرار شونده
- ۱۱۵..... ۱-۷-۶- تعریف هندسه شبکه‌ای

- ۱۱۶ ۲-۷-۶- تعریف سلول واحد از تجمیع یک یا چند سلول
- ۱۱۸ ۳-۷-۶- تعریف شبکه با گام و الگوی چیدمانی مشخص
- ۱۲۳ ۴-۷-۶- تعریف شبکه‌های راست‌گوش و شش‌گوش
- ۱۲۷ ۵-۷-۶- پیدا کردن سلول حاوی ذره در هندسه شبکه‌ای
- ۱۳۴ ۸-۶- تبدیل دستگاه‌های مختصات
- ۱۳۶ ۱-۸-۶- تبدیل دستگاه مختصات دکارتی
- ۱۴۱ ۲-۸-۶- نمایش ماتریسی معادلات سطوح
- ۱۴۳ ۳-۸-۶- معادله‌ی سطوح در دستگاه مختصات مرجع

- ۷- سطح مقطع‌های گروهی و تعریف ماده ۱۴۶
- ۸- آشنایی با مفاهیم آماری ۱۵۶
- ۸-۱- برآورد کننده‌ها ۱۵۶
- ۸-۲- میانگین نمونه‌ای ۱۵۹
- ۸-۳- واریانس نمونه‌ای ۱۶۰
- ۸-۴- واریانس میانگین ۱۶۲
- ۸-۵- کواریانس ۱۶۳
- ۸-۶- تقریب مقدار میانگین و واریانس کمیت آماری وابسته ۱۶۵

- ۱۶۹ ۷-۸- میانگین ساده چند تخمین گر
- ۱۷۰ ۸-۸- میانگین وزن شده
- ۱۷۲ ۹-۸- روش مونت کارلو
- ۱۷۳ ۱-۹-۸- قانون اعداد بزرگ
- ۱۷۴ ۲-۹-۸- قضیه حد مرکزی
- ۱۷۹ ۱۰-۸- دقت و صحت در محاسبات مونتکارلو
- ۱۸۴ ۱۱-۸- ارزیابی آماری نتایج
- ۱۸۴ ۱-۱۱-۸- خطای نسبی

۱۸۶ ۸-۱۱-۲- شاخص شایستگی

۱۸۷ ۸-۱۱-۳- واریانس واریانس نسبی

۱۹۰ ۹- محاسبات بحرانیت و روش توانی

۱۹۴ ۹-۱- همگرایی روش توانی

۱۹۸ ۱۰- شبیه‌سازی محاسبات بحرانیت

۲۰۱ ۱۰-۱- شبیه‌سازی چشمه شکافت

۲۰۲ ۱۰-۱-۱- وزن چشمه‌ی نوترونی

۲۰۳ ۱۰-۱-۲- نمونه‌برداری مکان چشمه

- ۱۰-۱-۳- نمونه برداری راستای حرکت نوترون ۲۰۴
- ۱۰-۱-۴- نمونه برداری انرژی چشمه نوترون ۲۰۷
- ۱۰-۲- شبیه سازی نقطه‌ی برخورد ۲۱۵
- ۱۰-۳-۱- شبیه سازی فیزیک برخورد ۲۱۸
- ۱۰-۳-۱-۱- شبیه سازی اندرکنش شکافت ۲۱۹
- ۱۰-۳-۲- شبیه سازی اندرکنش جذب ۲۲۱
- ۱۰-۳-۳- شبیه سازی اندرکنش پراکندگی ۲۲۶
- ۱۱- برآورد کننده‌های محاسبات بحرانیت ۲۴۲

۱۱-۱- برآورد کننده‌ی برخورد ضریب تکثیر موثر ۲۴۳

۱۱-۲- برآورد کننده‌ی جذب ضریب تکثیر موثر ۲۴۵

۱۱-۳- برآورد کننده‌ی طول پیمایش ضریب تکثیر موثر ۲۴۹

۱۱-۴- برآورد مقدار متوسط و انحراف معیار ضریب تکثیر ۲۵۱

۱۱-۵- برآورد کننده‌ی طول پیمایش برای شار متوسط حجمی ۲۵۴

۱۱-۵-۱- اندازه‌گیری شبکه‌های دکارتی ۲۶۰

۱۲- الگوریتم محاسبات بحرانیت با روش تکرار چشمه ۲۶۳

۱۳- رسم مقطع دو بعدی هندسه‌ی سیستم ۲۶۹

۱۴- راستی آزمایی ۲۷۲

۱۴-۱- محک‌های تحلیلی بحرانیت ۲۷۲

۱۴-۱-۱- راستی آزمایی پراکندگی همسانگرد و ناهمسانگرد خطی ۲۷۲

۱۴-۱-۲- راستی آزمایی چند گروهی با پراکندگی ناهمسانگرد مرتبه دو لژاندر ۲۷۷

۱۴-۲- محک صحت پیاده‌سازی احجام هندسی ۲۷۹

۱۴-۲-۱- آزمون اول ۲۸۰

۱۴-۲-۲- آزمون دوم ۲۸۲

۱۴-۲-۳- آزمون سوم ۲۸۴

- ۲۸۶ ۱۴-۳- راستی آزمایی ساختار تکرار شونده
- ۲۸۶ ۱۴-۳-۱- راستی آزمایی شبکه مربعی
- ۲۹۷ ۱۴-۳-۲- راستی آزمایی ساختار تکرار شونده شش گوش سه بعدی، یک گروهی ناهمسانگرد
- ۳۰۱ ۱۴-۴- راستی آزمایی شرایط مرزی
- ۳۰۱ ۱۴-۴-۱- راستی آزمایی شرط مرزی عادی و بازتابنده
- ۳۰۸ ۱۴-۴-۲- راستی آزمایی شرط مرزی سفید
- ۳۰۹ ۱۴-۴-۳- راستی آزمایی شرط مرزی متناوب
- ۳۱۴ ۱۴-۵- راکتور LMMFBR در هندسه X-Z

۱۴-۶- راکتور LMFBR در هندسه R-Z ۳۱۶

۱۵- نتیجه گیری ۳۱۸

۱۶- مراجع ۳۲۰

لیست شکل ها

- شکل ۱: دستگاه مختصات دکارتی راست گرد..... ۳۳
- شکل ۲: نمایش هندسی صفحه تخت ۳۵
- شکل ۳: نمایش هندسی سطح کروی ۳۷
- شکل ۴: نمایش هندسی سطح استوانه‌ای ۳۹
- شکل ۵: نمایش هندسی بیضی گون ۴۳
- شکل ۶: تصویر بیضی گون در صفحه‌ی XY ۴۴
- شکل ۷: نمایش هندسی استوانه با مقطع بیضی ۴۶
- شکل ۸: نمایش هندسی استوانه سهموی ۴۷
- شکل ۹: نمایش هندسی استوانه هذلولوی ۴۹

- شکل ۱۰: نمایش هندسی سهمی گون ۵۰
- شکل ۱۱: پارامترهای تعریف سهمی گون ۵۱
- شکل ۱۲: نمایش هندسی سهمی گون بیضوی ۵۳
- شکل ۱۳: نمایش هندسی سطح زینی شکل ۵۵
- شکل ۱۴: نمایش هندسی هذلولی گون تک پارچه ۵۷
- شکل ۱۵: نمایش هندسی هذلولی گون دو پارچه ۵۷
- شکل ۱۶: پارامترهای مربوط به تعریف هذلولی گون ۵۹
- شکل ۱۷: نمایش هندسی مخروط ۶۱
- شکل ۱۸: سلول ساده به همراه سطوح محدودکننده آن ۶۹
- شکل ۱۹: نمونه‌ای از سلول مرکب به همراه سطوح محدودکننده آن ۷۰

- شکل ۲۰: یک سلول مرکب به همراه شماره سطوح آن ۷۴
- شکل ۲۱: نمای دو بعدی از یک سطح بسته مکعب مستطیل که با شماره‌ی ۷ در ورودی کد تعریف شده است. ... ۷۷
- شکل ۲۲: تقسیم فضا به دو نیم‌فضا توسط یک سطح بسته ۷۸
- شکل ۲۳: تعریف سطح بسته‌ی AOP با استفاده از چهار بردار A_1, A_2, A_3, V ۸۱
- شکل ۲۴: تعریف سطح بسته‌ی RPP با استفاده از شش مختصه‌ی $X_{min}, X_{max}, Y_{min}, Y_{max}, Z_{min}, Z_{max}$ ۸۳
- شکل ۲۵: تعریف سطح بسته‌ی CYL با استفاده از دو بردار V و H و شعاع R ۸۵
- شکل ۲۶: تعریف سطح بسته‌ی HEX با استفاده از پنج بردار V, H, r, s, t ۸۷
- شکل ۲۷: ترتیب نامگذاری رویه‌های یک منشور قاعده شش ضلعی منتظم با شماره a در حالت دوران پادساعتگرد ۸۸
- شکل ۲۸: ترتیب نامگذاری رویه‌های یک منشور قاعده شش ضلعی منتظم با شماره a در حالت دوران ساعتگرد ۸۸
- شکل ۲۹: فاصله جهت‌دار نوترون تا یک سطح ۹۱

- شکل ۳۰: کوتاه‌ترین فاصله جهت‌دار یک نقطه از مرز سلول ۹۳
- شکل ۳۱: نمونه‌ای از بروز خطا در ردیابی ذره در سلول مرکب ۹۴
- شکل ۳۲: اصلاح نمونه‌برداری نقطه‌ی برخورد برای ذره‌های که از مرز سلول عبور کرده است ۱۰۲
- شکل ۳۳: مدل‌سازی برخورد ذره با مرز بازتابنده ۱۰۷
- شکل ۳۴: مدل‌سازی برخورد ذره با مرز متناوب ۱۱۱
- شکل ۳۵: نمونه‌ای از سلول واحد در هندسه شبکه‌ای ۱۱۷
- شکل ۳۶: نمونه‌ای از هندسه شبکه‌ای راست‌گوش ۱۱۹
- شکل ۳۷: چگونگی تعیین اندیس سلول واحدها در شبکه راست‌گوش ۱۲۰
- شکل ۳۸: چگونگی تعیین اندیس سلول واحدها در شبکه شش‌گوش ۱۲۱
- شکل ۳۹: نمونه‌ای از بردارهای واحد در هندسه شبکه‌ای راست‌گوش ۱۲۴

- شکل ۴۰: نمونه‌ای از بردارهای واحد در هندسه شبکه‌ای شش گوش ۱۲۶
- شکل ۴۱: نمونه‌ای از اندیس‌گذاری سلول‌های واحد در هندسه شبکه‌ای ۱۲۹
- شکل ۴۲: نمونه‌ای از مکان ذره در سلول شبکه‌ای ۱۳۱
- شکل ۴۳: نمایشی از توصیف هندسه سیستم در دو دستگاه مختصات مختلف ۱۳۴
- شکل ۴۴: دوران و انتقال دستگاه مختصات دکارتی نشان داده شده توسط دو دستگاه مختصات اصلی و محلی .. ۱۳۷
- شکل ۴۵: کسینوس هادی بین یکی از مؤلفه‌های دستگاه مختصات محلی و سه مؤلفه‌ی دستگاه مختصات مرجع ۱۴۰
- شکل ۴۶: نمایشی از تفاوت بین دقت و صحت نتایج آماری ۱۸۰
- شکل ۴۷: راستای حرکت نوترون ۲۰۵
- شکل ۴۸: طیف انرژی نوترون‌های آنی گسیل شده از شکافت برای هسته‌های ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu ۲۱۱
- شکل ۴۹: طیف متوسط انرژی نوترون‌های تاخیری گسیل شده از شکافت ^{235}U ۲۱۴

- شکل ۵۰: نمونه برداری نقطه‌ای برخورد و ترابرد نوترون ۲۱۸
- شکل ۵۱: استفاده از روش رولت روسی در شبیه سازی ضمنی جذب ۲۲۵
- شکل ۵۲: نمونه‌ای از تابع توزیع زاویه‌ی که به ازای تمامی مقادیر μ مثبت است. ۲۳۲
- شکل ۵۳: نمونه‌ای از تابع توزیع زاویه‌ی که به ازای برخی مقادیر μ منفی است. ۲۳۲
- شکل ۵۴: نمونه‌هایی از تابع توزیع جایگزین برای تابع توزیع پراکندگی ۲۳۳
- شکل ۵۵: راستای حرکت نوترون ورودی به و خروجی از اندرکنش پراکندگی ۲۳۹
- شکل ۵۶: نمایشی از دو تعبیر مختلف شار اسکالر ۲۵۵
- شکل ۵۷: روش ثبت شار حجمی برای یک طول پیمایش در اندازه‌گیری شبکه‌ای ۲۶۱
- شکل ۵۸: روندنمای محاسبات بحرانی سامانه چند ناحیه‌ای ساده با سطح مقطع‌های گروهی ۲۶۸
- شکل ۵۹: ابعاد بحرانی برای هندسه‌های تک ناحیه‌ای و سلول واحد یک ساختار شبکه‌ای بی‌نهایت ۲۷۵

- شکل ۶۰: نمای دو بعدی هندسه سیستم مورد بررسی در آزمون اول ۲۸۱
- شکل ۶۱: نمای برشی هندسه سیستم مورد بررسی در آزمون دوم ۲۸۳
- شکل ۶۲: نمای برشی هندسه سیستم مورد بررسی در آزمون سوم ۲۸۵
- شکل ۶۳: هندسه مسئله راستی آزمایی C5G7 متشکل از ۱۶ مجتمع سوخت و بازتابنده ۲۸۷
- شکل ۶۴: سلول واحد مسئله راستی آزمایی C5G7 ۲۸۸
- شکل ۶۵: تقارن یک چهارم، نمای افقی و نمای عمودی مسئله راستی آزمایی C5G7 ۲۸۹
- شکل ۶۶: تقارن یک چهارم، نمای عمودی آرایش Rodded-A مسئله راستی آزمایی C5G7 ۲۹۰
- شکل ۶۷: توزیع شار نوترون گروه ۱ برای لایه اول آرایش Rodded-A (C5G7) ۲۹۲
- شکل ۶۸: توزیع شار نوترون گروه ۱ برای لایه دوم آرایش Rodded-A (C5G7) ۲۹۳
- شکل ۶۹: توزیع شار نوترون گروه ۱ برای لایه سوم آرایش Rodded-A (C5G7) ۲۹۴

- شکل ۷۰: توزیع شار نوترون گروه ۱ برای لایه چهارم آرایش (C5G7) Rodded-A ۲۹۵
- شکل ۷۱: ضریب تکثیر موثر ترکیبی با متوسط گیری معمولی و وزن شده کوواریانس ۲۹۹
- شکل ۷۲: توزیع شار و هندسه مسئله راستی آزمایی شش گوش، سه بعدی، تک گروهی ۳۰۰
- شکل ۷۳: هندسه مسئله راستی آزمایی C5G7 متشکل از ۱۶ مجتمع سوخت و بازتابنده ۳۰۲
- شکل ۷۴: تقارن ۱/۸ هندسه مسئله راستی آزمایی C5G7 با استفاده از شرط مرزی بازتابنده ۳۰۳
- شکل ۷۵: سیستم تیغهای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده ۳۱۰
- شکل ۷۶: مقایسه شار گروه ۱ سیستم تیغهای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده ۳۱۱
- شکل ۷۷: مقایسه شار گروه ۴ سیستم تیغهای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده ۳۱۲
- شکل ۷۸: مقایسه شار گروه ۷ سیستم تیغهای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده ۳۱۳
- شکل ۷۹: هندسه راکتور LMFBR ۳۱۵

لیست جدول‌ها

- جدول شماره ۱: سطوح پایه قابل تعریف در کد MCTRAN ۶۳
- جدول شماره ۲: رویه‌های محصور کننده‌ی سطح بسته‌ی AOP با شماره‌ی a به ترتیب نامگذاری در کد ۸۲
- جدول شماره ۳: رویه‌های محصور کننده‌ی سطح بسته‌ی RPP با شماره‌ی a به ترتیب نامگذاری در کد ۸۴
- جدول شماره ۴: رویه‌های محصور کننده‌ی سطح بسته‌ی CYL با شماره‌ی a به ترتیب نامگذاری در کد ۸۶
- جدول شماره ۵: رویه‌های محصور کننده‌ی سطح بسته‌ی HEX با شماره‌ی a به ترتیب نامگذاری در کد ۸۹
- جدول شماره ۶: نحوه ذخیره اطلاعات مربوط به لایه‌های مختلف در هندسه شبکه‌ای ۱۳۳
- جدول شماره ۷: خطای گرد کردن در مقادیر محاسبه شده توسط رایانه برای دو کمیت با مقدار متوسط یک ۱۸۲
- جدول شماره ۸: ابعاد بحرانی مسائل نمونه تحلیلی تک ناحیه‌ای ۲۷۳
- جدول شماره ۹: ابعاد بحرانی مسائل نمونه تحلیلی دو ناحیه‌ای ۲۷۴

- جدول شماره ۱۰: نتایج کد MCTRAN برای ضریب تکثیر موثر محک‌های تحلیلی..... ۲۷۶
- جدول شماره ۱۱: سطح مقاطع ناهمسانگرد ماکروسکوپی یک گروهی برای سیستم بحرانی..... ۲۷۷
- جدول شماره ۱۲: ضریب تکثیر سیستم بحرانی ناهمسانگرد با یک و شش گروه..... ۲۷۹
- جدول شماره ۱۳: سطح مقاطع یک گروهی Pub-1-0..... ۲۸۰
- جدول شماره ۱۴: نتایج مربوط به ضریب تکثیر موثر برای آزمون اول..... ۲۸۱
- جدول شماره ۱۵: نتایج مربوط به ضریب تکثیر موثر برای آزمون دوم..... ۲۸۳
- جدول شماره ۱۶: نتایج مربوط به ضریب تکثیر موثر برای آزمون سوم..... ۲۸۵
- جدول شماره ۱۷: ضریب تکثیر مؤثر آرایش Rodded-A (C5G7)..... ۲۹۱
- جدول شماره ۱۸: متوسط و بیشینه توان میله‌ای برای مجتمع‌های مختلف آرایش Rodded-A (C5G7)..... ۲۹۶
- جدول شماره ۱۹: سطح مقاطع ناهمسانگرد ماکروسکوپی یک گروهی (راستی‌آزمایی شش گوش)..... ۲۹۷

- جدول شماره ۲۰: ضریب تکثیر مؤثر آرایش (C5G7) Rodded-A ۳۰۵
- جدول شماره ۲۱: متوسط و بیشینه توان میله‌ای مجتمع‌های مختلف آرایش (C5G7) Rodded-A-کل قلب... ۳۰۶
- جدول شماره ۲۲: متوسط و بیشینه توان میله‌ای مجتمع‌های مختلف آرایش (C5G7) Rodded-A-۱/۸ قلب. ۳۰۷
- جدول شماره ۲۳: ضریب تکثیر مؤثر سلول واحد سوخت UO_2 از مسئله راستی آزمایشی C5G7 با مرز سفید..... ۳۰۸
- جدول شماره ۲۴: ضریب تکثیر سیستم تیغه‌ای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده. ۳۱۴
- جدول شماره ۲۵: مقایسه نتایج مربوط به راکتور LMFBR ۳۱۶
- جدول شماره ۲۶: مقایسه نتایج مربوط به راکتور LMFBR در هندسه R-Z ۳۱۷

۱- چکیده

کد MCTRAN یک نسخه جدید و توسعه داده شده از کد MC3-1D برای انجام محاسبات بحرانی چند گروهی بر مبنای روش مونت کارلو می‌باشد. این کد به زبان فرترن ۹۰ نوشته شده است. در این نسخه زیرروال‌های مربوط به تعریف هندسه و ردیابی نوترون متحول شده و کد قادر به شبیه‌سازی هندسه‌های پیچیده و سه بعدی شده است. در این کد توانایی تعریف هندسه‌ی سیستم بر مبنای روش هندسه ترکیبی با استفاده از سطوح درجه‌ی یک، دو و احجام هندسی به همراه عملگرهای منطقی در دستگاه‌های مختصات دکارتی وجود دارد. همچنین در این کد قابلیت تعریف هندسه‌های شبکه‌ای چند لایه راست گوش و شش گوش (عادی و چرخیده) با استفاده از مفهوم سلول واحد و ساختار تکرار شونده افزوده شده است. در این کد از سطح مقاطع گروهی برای شبیه‌سازی فیزیک برخورد نوترون استفاده شده است، همچنین از مبدل داخلی برای لحاظ نمودن اثر ناهمسانگردی پراکندگی (بیان شده بر اساس ضرایب بسط لژاندار) در روش مونت کارلو استفاده شده

است. این کد قابلیت محاسبه شار گروهی و توان متوسط حجمی بر روی شبکه‌ای از المان‌های دکارتی علاوه بر محاسبه ضریب تکثیر را دارا می‌باشد.

بخش‌های مختلف کد MCTRAN با استفاده از محک‌های تحلیلی و همچنین با نتایج بدست آمده از کد MCNP برای مسائل نمونه مختلف مورد بررسی و راستی‌آزمایی قرار گرفته است که نتایج بررسی‌ها بیانگر دقت و صحت مناسب کد می‌باشد.

۲- کلیدواژه

ترابرد نوترون، روش مونت کارلو، مسئله بحرانیت، سطح مقاطع گروهی، پراکندگی ناهمسانگرد، سلول ساده و مرکب، سلول واحد، ساختارهای تکرار شونده، شبکه راست گوش، شبکه شش گوش.

۳- اختصارات

توضیح	عبارت اختصاری	عبارت
کد محاسباتی یک بعدی ترابرد نوترون برای محاسبات گروهی بحرانیت به روش مونت کارلو	MC3-1D	<u>1-D</u> Neutron Transport Computational Code for Multigroup <u>Monte Carlo</u> <u>Criticality</u> <u>Calculation</u>
کد سه بعدی ترابرد نوترون به روش مونت کارلو برای محاسبات گروهی بحرانیت	MCTTRAN	3-D <u>Monte Carlo</u> Neutron <u>Transport</u> Code for Multigroup <u>Criticality</u> <u>Calculation</u>
کد محاسبات ترابرد ذرات به روش مونت کارلو	MCNP	General purpose <u>Monte Carlo</u> <u>N-Particle</u> code

۴- مقدمه

معادله‌ی ترابرد نوترون، توصیف کننده‌ی رفتار متوسط تعداد بسیار زیاد نوترون در یک سیستم می‌باشد، که با استفاده از روش‌های یقینی همراه با در نظر گرفتن ساده‌سازی‌های روی هندسه سیستم و گسسته‌سازی فضای فاز قابل حل می‌باشد. اما در روش شبیه‌سازی مونت کارلو، معادله‌ی حاکم بر رفتار متوسط نوترون یا همان معادله‌ی ترابرد حل نمی‌گردد بلکه با توجه به فیزیک حاکم بر ترابرد نوترون^۱، رفتار جمعیت نمونه‌ای از نوترون‌ها در سیستم شبیه‌سازی شده و با استفاده از مفاهیم و برآوردکننده‌های آماری، کمیت‌های مورد نظر از ترابرد نوترون در سیستم، استخراج می‌گردد. در واقع رفتار

۱ نوترون در طی فرآیند ترابرد در محیط، با زنجیره‌ای از رخدادهای تصادفی روبرو می‌باشد، این رخدادهای تصادفی با توجه به فیزیک مسئله، از توابع توزیع خاصی تبعیت می‌کنند.

متوسط ذرات نمونه شبیه‌سازی شده با استفاده از قضیه حد مرکزی به عنوان رفتار متوسط ذرات در سیستم فیزیکی در نظر گرفته می‌شود، بنابراین برای دستیابی به یک پاسخ قابل قبول باید تعداد بسیار زیادی ذره نمونه شبیه‌سازی شوند که این امر منجر به زمان‌بر شدن این روش می‌گردد. با این حال با توجه به توسعه و پیشرفت روزافزون در سرعت و توانایی محاسباتی رایانه‌ها و همچنین بهره‌گیری از روش موازی سازی محاسبات، اقبال به سمت روش مونت کارلو نیز رو به افزایش می‌باشد.

به طور کلی در شبیه‌سازی ترابرد نوترون به روش مونت کارلو، می‌توان مکان، زاویه و انرژی را به صورت پیوسته در نظر گرفته و از این رو از خطاهای ناشی از گسسته‌سازی اجتناب نمود. اما در کد محاسبات بحرانیته مونت کارلو MCTRAN از سطح مقاطع گروهی استفاده می‌شود، البته در این کد محدودیت چندانی بر روی تعریف هندسه سیستم وجود ندارد و می‌توان رفتار نوترون را در هندسه‌های خیلی پیچیده شبیه‌سازی نمود.

۵- دامنه گزارش

این گزارش شامل چگونگی تعریف هندسه سیستم و همچنین چگونگی تعریف سطح مقاطع مواد موجود در سیستم برای کد MCTRAN می‌باشد. همچنین در این گزارش مراحل شبیه‌سازی ترابرد نوترون در سیستم برای انجام محاسبات بحرانیّت به طور جزئی و مرحله به مرحله توضیح داده شده است. در انتها صحت عملکرد کد با چند مسئله آزمون نشان داده شده است.

۶- هندسه سیستم

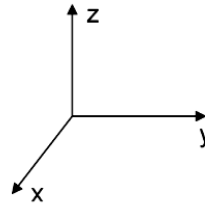
بخش هندسه یکی از بخش‌های مهم در روند شبیه‌سازی ترابرد ذرات به روش مونت کارلو می‌باشد. در کدهای مونت کارلو بدلیل ماهیت آماری روش حل، محدودیتی در تعریف هندسه اعمال نمی‌شود لذا می‌توان با بهره‌گیری از روشی مناسب پیچیده‌ترین هندسه‌ها را برای مسئله تعریف نمود.

در کد MCTRAN از شیوهی موسوم به هندسه ترکیبی برای ساختن هندسه‌ی سه بعدی پیچیده و دلخواه استفاده می‌شود. این روش برای تعریف هندسه یک روش بسیار قدرتمند و کارآمد می‌باشد. در این روش فضای سه بعدی که تاریخچه‌ها در آن شبیه‌سازی می‌شوند، به صورت ترکیبی از سلول‌های (حجم‌های) همگن مجاور هم در نظر گرفته می‌شوند. هر سلول می‌تواند حاوی ترکیب همگنی از مواد و یا خلاء باشد. هر سلول توسط یک و یا بیش از یک سطح محصور کننده تعریف می‌گردد. سطوح محدود کننده‌ی سلول‌ها معمولاً توسط توابع ساده درجه‌ی یک (صفحات تخت) یا توابع درجه‌ی دو (کره‌ها، استوانه‌ها و ...) تعریف می‌گردند. به طور کلی با تعریف نمودن سطوح پایه در کد و استفاده نمودن از عملگرهای اجتماع، اشتراک و متمم در ورودی کد، می‌توان سلول‌های مد نظر را برای کد معرفی نمود.

همچنین در کد MCTRAN برای سهولت در تعریف هندسه قابلیت‌های همچون احجام هندسی، ساختارهای تکرار شونده به همراه تبدیل دستگاه‌های مختصات فراهم شده است که در ادامه به هر کدام از این موارد به تفصیل پرداخته می‌شود.

۶-۱- سطوح پایه

قبل از پرداختن به تعریف انواع سطوح باید به این نکته اشاره شود که تمامی محاسبات در کد MCTRAN در دستگاه مختصات دکارتی راست گرد مطابق شکل ۱ انجام می شود.



شکل ۱: دستگاه مختصات دکارتی راست گرد

با توجه به نوع کاربرد کدهای مونت کارلو می توان قابلیت استفاده از انواع سطوح مختلف را برای آن در نظر گرفت. در کدهای محاسبات بحرانیّت در اکثر موارد تنها سطوح درجه یک و درجه دو کاربرد دارند. لذا در کد MCTRAN فقط

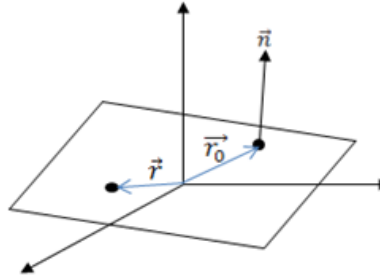
امکان تعریف سطوح درجه یک و دو فراهم شده است. هر سطحی دارای معادله‌ی عمومی همراه با ضرایب متغیر مختص به خود می‌باشد، لذا برای تعریف نمودن یک سطح خاص کافی است ضرایب معادله‌ی عمومی آن معین گردد. معادله عمومی حاکم بر سطوح را می‌توان با رابطه زیر بیان کرد:

$$f(x, y, z) = 0 \quad (1-6)$$

آشنایی با معادله‌ی عمومی در نظر گرفته شده برای هر یک از این سطوح در کد برای تعیین ضرایبی که باید از ورودی دریافت شوند، امری ضروری است. در ادامه معادلات، پارامترها و علامت اختصاری در نظر گرفته شده برای تعریف انواع سطوح، مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۶-۱-۱- سطح درجهی یک

سطح درجهی یک یا صفحه تخت ساده ترین نوع سطح می باشد. از نظر هندسی صفحه تخت مکان هندسی نقاطی است که بردار بین آن نقاط و یک مبدا مشترک، بر یک محور عمود باشد.



شکل ۲: نمایش هندسی صفحه تخت

بیان ریاضی این تعریف به شکل رابطه ی زیر می باشد.

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = 0$$

(۲-۶)

در این رابطه $\vec{n} = (A, B, C)$ بردار نرمال صفحه و $\vec{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ یک نقطه اختیاری روی صفحه می باشد. شکل عمومی تعریف آن در کد به شکل زیر بیان می شود:

$$P: Ax + By + Cz - D = 0$$

(۳-۶)

$$D = Ax_0 + By_0 + Cz_0$$

بنابراین برای تعریف یک صفحه تخت در حالت کلی چهار پارامتر (A, B, C, D) لازم است. در بیشتر مواقع در تعریف سلولها تنها نیاز به صفحات تختی می باشد که نرمال آنها را محورهای مختصات تشکیل می دهند. با توجه به کاربرد زیاد این سطوح تعریفهای جداگانه ای به صورت زیر در کد برای آنها بیان شده است:

• صفحه ای که نرمال آن محور x می باشد: $PX: x - D = 0$

• صفحه ای که نرمال آن محور y می باشد: $PY: y - D = 0$

• صفحه ای که نرمال آن محور z می باشد: $PZ: z - D = 0$

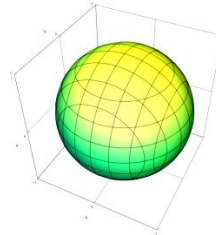
۶-۱-۲- سطح درجهی دو کروی

کره مکان هندسی نقاطی از فضا است که از یک نقطه (x', y', z') به یک فاصله (R) هستند، بعبارتی دیگر:

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = R^2 \quad (۴-۶)$$

$$S: (x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2 - R^2 = 0$$

در رابطه‌ی فوق (x', y', z') مختصات مرکز کره و R شعاع آن می‌باشد. بنابراین برای دستیابی به معادله‌ی کره، کافی است تا این مقادیر از ورودی گرفته شود.



شکل ۳: نمایش هندسی سطح کروی

به منظور سهولت در تعریف برخی حالت‌های خاص کره، موارد زیر به صورت جداگانه در کد قابل تعریف می‌باشند:

$$SO: x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$$

$$SX: (x - x')^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$$

$$SY: x^2 + (y - y')^2 + z^2 - R^2 = 0$$

$$SZ: x^2 + y^2 + (z - z')^2 - R^2 = 0$$

(۵-۶)

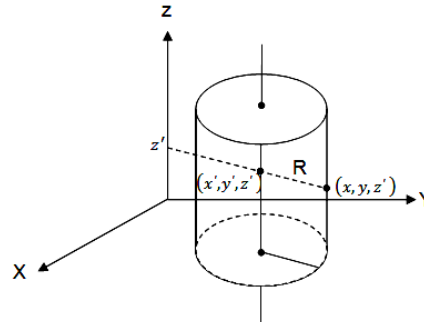
- کره‌ای که مرکز آن روی مبدأ مختصات است: SO
- کره‌ای که مرکز آن روی محور X قرار دارد: SX
- کره‌ای که مرکز آن روی محور Y قرار دارد: SY
- کره‌ای که مرکز آن روی محور Z قرار دارد: SZ

۶-۱-۳- سطح درجهی دو استوانه‌ای

استوانه مکان هندسی نقاطی از فضا است که از یک خط (محور استوانه) به یک فاصله می‌باشند، بعبارتی دیگر یعنی:

$$(\vec{r} - \vec{P})^2 - (\vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{P}))^2 - R^2 = 0 \quad (۶-۶)$$

در این معادله \vec{n} بردار واحد در جهت محور استوانه، بردار \vec{P} نقطه‌ی ثابت روی محور استوانه و R شعاع استوانه می‌باشد.



شکل ۴: نمایش هندسی سطح استوانه‌ای

تعریف استوانه با فرم کلی در فضا کمی مشکل است و عموماً از استوانه‌هایی که محور آنها موازی محورهای مختصات می‌باشد استفاده می‌شود. به منظور تعریف انواع مختلف استوانه، دسته‌بندی زیر در کد لحاظ شده است:

$$CPX: (y - y')^2 + (z - z')^2 - R^2 = 0$$

$$CPY: (x - x')^2 + (z - z')^2 - R^2 = 0$$

$$CPZ: (x - x')^2 + (y - y')^2 - R^2 = 0$$

$$CX: y^2 + z^2 - R^2 = 0$$

(۷-۶)

$$CY: x^2 + z^2 - R^2 = 0$$

$$CZ: x^2 + y^2 - R^2 = 0$$

۴. محور استوانه روی محور x : CX

۱. استوانه موازی با محور x : CPX

۵. محور استوانه روی محور y : CY

۲. استوانه موازی با محور y : CPY

۶. محور استوانه روی محور z : CZ

۳. استوانه موازی با محور z : CPZ

۶-۱-۴- سطوح درجه‌ی دو عمومی

سطوح درجه دو عمومی در کد با نشانگر GQ تعریف شده و شکل کلی معادله‌ی آن‌ها بصورت زیر است:

$$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gx + Hy + Jz + K = 0 \quad (۶-۸)$$

با استفاده از ثوابت مختلف در معادله‌ی فوق می‌توان انواع سطوح درجه دو را ایجاد کرد. این معادله مبین ده سطح مستقل و یکتا بعد از اعمال انتقال و دوران می‌باشد. بیضی‌گون، استوانه بیضوی، استوانه سهموی، استوانه‌ی هذلولوی، سهمی‌گون بیضوی، سهمی‌گون هذلولوی، هایپربولیک یک پارچه، هایپربولیک دو پارچه، مخروط بیضوی و صفحه تخت از جمله این سطوح بشمار می‌آیند.

۶-۱-۴-۱- بیضی گون^۲

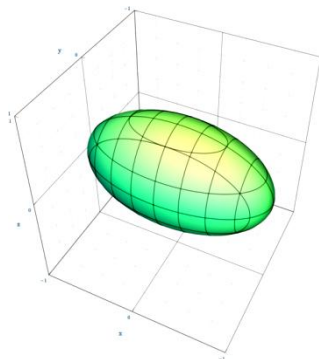
بیضی گون سطحی است که از دوران یک بیضی حول یکی از محورهایش حاصل می‌گردد. رابطه‌ی کلی این نوع سطح به صورت زیر مطرح می‌گردد:

$$\frac{(x - x')^2}{a^2} + \frac{(y - y')^2}{b^2} + \frac{(z - z')^2}{c^2} = 1 \quad (۹-۶)$$

فرم GQ بیضی گون به صورت زیر می‌باشد.

$$\frac{1}{a^2}x^2 + \frac{1}{b^2}y^2 + \frac{1}{c^2}z^2 - \frac{2x'}{a^2}x - \frac{2y'}{b^2}y - \frac{2z'}{c^2}z + \left(\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{c^2} - 1\right) = 0 \quad (۱۰-۶)$$

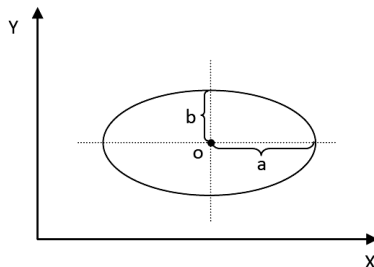
 Ellipsoid ۲



شکل ۵: نمایش هندسی بیضی گون

در این رابطه (x', y', z') نشان دهنده مختصات مرکز بیضی گون (محل تقاطع محورهای تقارن) و a ، b و c فاصله‌ی سطح بیضی گون تا مرکز آن به ترتیب در جهات x ، y و z می‌باشد. جهت دستیابی به پارامترهای فوق لازم است تصویر بیضی گون حداقل در دو صفحه از صفحات مختصات بررسی شود. به عنوان نمونه تصویر شکل ۵ در صفحه xy به صورت

زیر می‌باشد:



شکل ۶: تصویر بیضی گون در صفحه‌ی XY

در شکل فوق O مرکز بیضی گون و a و b نیز فاصله‌ی سطح بیضی گون تا مرکز آن به ترتیب در جهات X و Y می‌باشد. جهت دستیابی به پارامتر C نیز لازم است تصویر بیضی گون در یکی از صفحات XZ یا YZ مورد بررسی قرار گیرد.

کره حالت خاصی از بیضی گون می‌باشد که در آن $a = b = c$ و برابر با شعاع کره می‌باشند.

۶-۱-۴-۲- استوانه بیضوی^۳

فرم کلی معادله‌ی استوانه با مقطع بیضی و موازی با محور z، به فرم زیر می‌باشد:

$$\frac{(x - x')^2}{a^2} + \frac{(y - y')^2}{b^2} = 1 \quad (۱۱-۶)$$

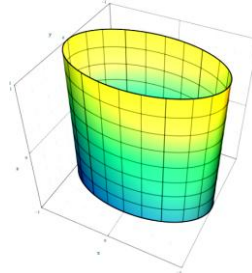
فرم GQ استوانه به صورت زیر می‌باشد.

$$\frac{1}{a^2}x^2 + \frac{1}{b^2}y^2 - \frac{2x'}{a^2}x - \frac{2y'}{b^2}y + \left(\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} - 1\right) = 0 \quad (۱۲-۶)$$

در این رابطه (x', y') نشان دهنده‌ی مختصات مرکز بیضی‌گون (محل تقاطع محورهای تقارن) و a ، b فاصله‌ی سطح بیضی‌گون تا مرکز آن به ترتیب در جهات x ، y می‌باشد.

 Elliptic Cylinder ۳

استوانه با قاعده دایره حالت خاصی از این سطح می باشد.



شکل ۷: نمایش هندسی استوانه با مقطع بیضی

۶-۱-۴-۳- استوانه سهموی^۴

رابطه‌ی کلی مربوط به یک استوانه‌ی سهموی موازی با محور Z نیز به صورت زیر است:

$$(x - x')^2 + 2a(y - y') = 0$$

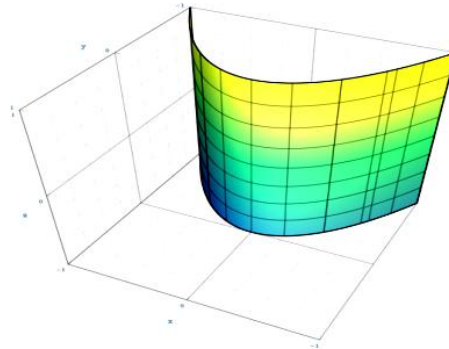
(۶-۱۳)

۴ parabolic cylinders

فرم GQ استوانه سهموی به صورت زیر می باشد.

$$x^2 - 2x'x + 2ay + (x'^2 - 2ay') = 0$$

(۱۴-۶)



شکل ۸: نمایش هندسی استوانه سهموی

در رابطه‌ی فوق a نشان دهنده‌ی میزان خمیدگی یا انحنا و (x', y') نشان دهنده‌ی مختصات رأس سهمی مولد می باشد. این کمیت‌ها در شکل ۱۱ نشان داده خواهد شد.

۶-۱-۴-۴- استوانه‌ی هذلولوی^۵:

رابطه‌ی استوانه‌ی هذلولوی موازی محور Z نیز به شرح زیر است:

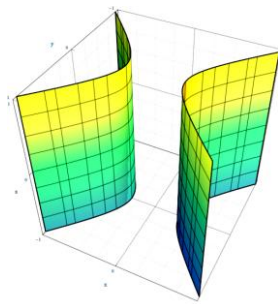
$$\frac{(x - x')^2}{a^2} - \frac{(y - y')^2}{b^2} = 1 \quad (۱۵-۶)$$

فرم GQ استوانه هذلولوی به صورت زیر می‌باشد.

$$\frac{1}{a^2} x^2 - \frac{1}{b^2} y^2 - \frac{2x'}{a^2} x + \frac{2y'}{b^2} y + \left(\frac{x'^2}{a^2} - \frac{y'^2}{b^2} - 1 \right) = 0 \quad (۱۶-۶)$$

hyperbolic cylinders ^۵

در روابط مطرح شده (x', y') مختصات مرکز هذلولوی مولد، a ، b نیز پارامترهای مربوط به تعریف هذلولوی می باشد، جزئیات این پارامترها در شکل ۱۶ نمایش داده خواهد شد.

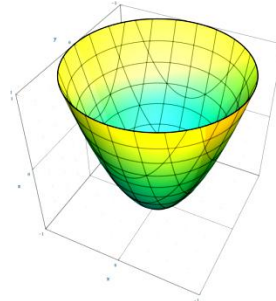


شکل ۹: نمایش هندسی استوانه هذلولوی

۶-۱-۴-۵- سهمی گون بیضوی^۶

سهمی گون حاصل دوران یک سهمی حول محور تقارنش می‌باشد. به عنوان مثال اگر سهمی مولد در صفحه‌ی XZ قرار داشته باشد، آن گاه رابطه‌ی مربوط به سهمی گون حاصل به صورت زیر خواهد بود:

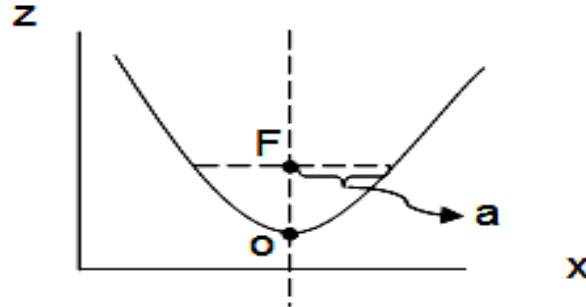
$$\frac{(x - x')^2}{a^2} + \frac{(y - y')^2}{a^2} - (z - z') = 0 \quad (۱۷-۶)$$



شکل ۱۰: نمایش هندسی سهمی گون

Elliptic paraboloid ۶

در رابطه‌ی فوق a نشان دهنده‌ی میزان خمیدگی یا انحنای (x', y', z') نشان دهنده‌ی مختصات رأس سهمی مولد می‌باشد. این پارامترها در شکل ۱۱ نشان داده شده است:



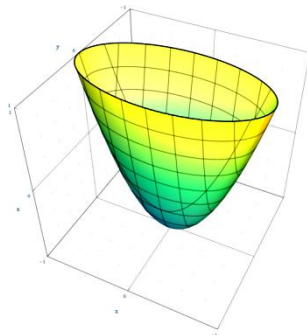
شکل ۱۱: پارامترهای تعریف سهمی گون

در شکل فوق نقطه‌ی 0 رأس سهمی، F کانون سهمی^۷ و a نیز میزان انحنای آن را نشان می‌دهد.^۸ اگر دوران سهمی با انحنای یکنواخت صورت نگیرد، آن‌گاه شکلی با مقطع بیضی حاصل خواهد شد. این نوع از سطوح سهمی گون بیضوی نام دارند. برای همان سهمی مطرح شده در مثال قبل، رابطه‌ی سهمی گون بیضوی به صورت زیر خواهد بود:

$$\frac{(x - x')^2}{a^2} + \frac{(y - y')^2}{b^2} - (z - z') = 0 \quad (۱۸-۶)$$

۷ سهمی مکان هندسی تمام نقاطی از یک صفحه است که از یک خط ثابت در آن صفحه و یک نقطه‌ی ثابت خارج از خط مذکور و واقع در صفحه، به یک فاصله باشد. نقطه‌ی ثابت را کانون و خط ثابت را خط هادی سهمی می‌نامیم.

۸ در این مورد چون دوران سهمی با شعاع ثابت صورت می‌گیرد، لذا تصویر سهمی گون حاصل در صفحات XZ و YZ یکسان بوده و بررسی یکی از آن‌ها جهت دستیابی به پارامترهای معادله کافی می‌باشد.



شکل ۱۲: نمایش هندسی سهمی گون بیضوی

در رابطه‌ی فوق a و b به ترتیب نشان دهنده‌ی میزان انحنا در صفحه‌ی XZ و YZ و (x', y', z') نیز مختصات رأس سهمی مولد می‌باشند. پارامترهای مذکور همانند آنچه در شکل ۱۱ نشان داده شده می‌باشند، با این تفاوت که جهت دستیابی به مقدار b باید تصویر سهمی گون در صفحه‌ی YZ نیز مورد بررسی قرار گیرد.

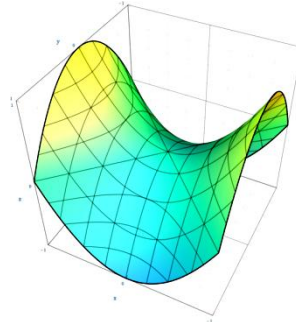
فرم GQ سهمی گون بیضوی به صورت زیر می‌باشد.

$$\frac{1}{a^2}x^2 + \frac{1}{b^2}y^2 - \frac{2x'}{a^2}x - \frac{2y'}{b^2}y - z + \left(z' + \frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} \right) = 0 \quad (19-6)$$

۶-۱-۴-۶- سهمی گون هذلولوی^۹ (سطح زینی)

از دیگر سطوح درجه دوم قابل تعریف در کد سطح زینی شکل یا سهمی گون هذلولوی می باشد. نمونه ای از این سطح در شکل ۱۳ نشان داده شده است:

hyperbolic paraboloids ۹



شکل ۱۳: نمایش هندسی سطح زینی شکل

رابطه‌ی کلی سطح زینی موازی با محور Z به قرار زیر است:

$$\frac{(x - x')^2}{a^2} - \frac{(y - y')^2}{b^2} - (z - z') = 0 \quad (۲۰-۶)$$

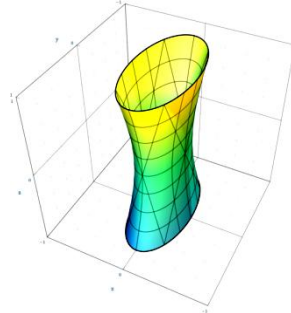
در رابطه فوق (x', y', z') مختصات مرکز سهمی گون هذلولوی و a و b پارامترهای مربوط به تعریف شکل زینی (مقادیر انحنا در راستای مورد نظر) می‌باشند.

فرم GQ سهمی گون هذلولوی به صورت زیر می باشد.

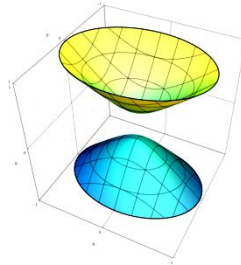
$$\frac{1}{a^2}x^2 - \frac{1}{b^2}y^2 - \frac{2x'}{a^2}x + \frac{2y'}{b^2}y - z + \left(z' + \frac{x'^2}{a^2} - \frac{y'^2}{b^2}\right) = 0 \quad (۲۱-۶)$$

۶-۱-۴-۷- هذلولوی گون یک و دو پارچه

این نوع از سطح حاصل دوران یک هذلولی حول یکی از محورهایش می باشد. انواع هذلولی گون ها با توجه به اینکه دوران حول کدام یک از محورها انجام می شود، معین می گردند. دوران هذلولی حول محور ناکانونی (محور ناقاطع) هذلولی گون تک پارچه (شکل ۱۴) و حول محور کانونی (محور قاطع) هذلولی گون دو پارچه (شکل ۱۵) نامیده می شود.



شکل ۱۴: نمایش هندسی هذلولی گون تک پارچه



شکل ۱۵: نمایش هندسی هذلولی گون دو پارچه

رابطه‌ی کلی برای یک هذلولی گون تک پارچه موازی با محور Z به صورت زیر مطرح می‌شود:

$$\frac{(x - x')^2}{a^2} + \frac{(y - y')^2}{b^2} - \frac{(z - z')^2}{c^2} = 1 \quad (22-6)$$

رابطه کلی مربوط به هذلولی گون دو پارچه و موازی با محور Z نیز به شرح زیر است:

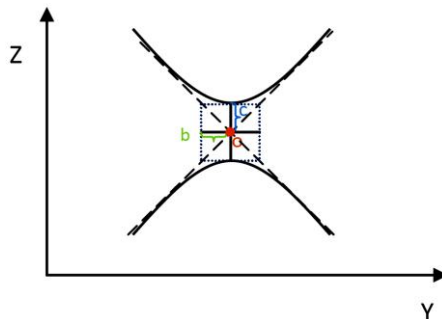
$$\frac{(x - x')^2}{a^2} + \frac{(y - y')^2}{b^2} - \frac{(z - z')^2}{c^2} = -1 \quad (23-6)$$

فرم GQ معادلات فوق به ترتیب به صورت زیر می‌باشند:

$$\frac{1}{a^2} x^2 + \frac{1}{b^2} y^2 - \frac{1}{c^2} z^2 - \frac{2 x'}{a^2} x - \frac{2 y'}{b^2} y + \frac{2 z'}{c^2} z + \left(\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} - \frac{z'^2}{c^2} - 1 \right) = 0 \quad (24-6)$$

$$\frac{1}{a^2} x^2 + \frac{1}{b^2} y^2 - \frac{1}{c^2} z^2 - \frac{2 x'}{a^2} x - \frac{2 y'}{b^2} y + \frac{2 z'}{c^2} z + \left(\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} - \frac{z'^2}{c^2} + 1 \right) = 0 \quad (25-6)$$

در روابط مطرح شده (x', y', z') مختصات مرکز هذلولی مولد، a ، b و c نیز پارامترهای مربوط به تعریف هذلولی گون می‌باشد. به منظور دستیابی به این پارامترها لازم است که با توجه به نوع هذلولی گون، آن را در دو صفحه از صفحات مختصات تصویر نماییم. به عنوان نمونه هذلولی گون‌های نشان داده شده در شکل‌های ۱۴ و ۱۵ باید در دو صفحه‌ی XZ و YZ تصویر شوند. شکل ۱۶ تصویر هذلولی گون شکل ۱۵ در صفحه‌ی YZ و پارامترهای مربوط به آن را نشان می‌دهد:



شکل ۱۶: پارامترهای مربوط به تعریف هذلولی گون

در شکل فوق O مرکز هذلولی مولد و b و c پارامترهای مربوط به معادله‌ی هذلولی گون می‌باشند. دستیابی به پارامتر a نیز به صورت مشابه و با بررسی تصویر هذلولی گون در صفحه‌ی XZ صورت می‌پذیرد.

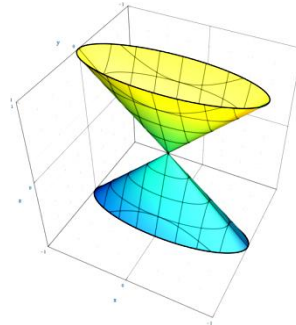
۶-۱-۴-۸- مخروط ۱۰

مخروط مکان هندسی نقاطی از فضا است که با یک محور (محور تقارن مخروط) در یک نقطه (رأس مخروط) زاویه ثابتی (زاویه‌ی دهانه‌ی مخروط) می‌سازند. معادله‌ی عمومی یک مخروط به صورت رابطه‌ی (۶-۲۷) می‌باشد :

$$(\vec{r} - \vec{P})^2 - (1 + t^2)[(\vec{r} - \vec{P}) \cdot \vec{U}]^2 = 0 \quad (۶-۲۶)$$

در این معادله بردار \vec{P} نشان دهنده‌ی موقعیت رأس مخروط و بردار واحد \vec{U} در جهت محور تقارن مخروط و θ زاویه‌ی دهانه‌ی مخروط می‌باشد. این معادله نشان‌دهنده‌ی دو مخروط هم محور و متقارن نسبت به رأس می‌باشد لذا برای تمیز

دادن این دو مخروط به طور قراردادی مقدار θ بین صفر تا $\frac{\pi}{2}$ محدود می گردد و آنگاه با استفاده از بردار \vec{U} جهت گیری مخروط مشخص می شود.



شکل ۱۷: نمایش هندسی مخروط

رابطه‌ی کلی یک مخروط با مقطع بیضی و موازی محور Z به صورت زیر مطرح می شود:

$$\frac{(x - x')^2}{a^2} + \frac{(y - y')^2}{b^2} - \frac{(z - z')^2}{c^2} = 0 \quad (۲۷-۶)$$

در رابطه‌ی فوق (x', y', z') نشان دهنده‌ی مختصات رأس مخروط می‌باشد. پارامترهای a و b و c نیز به گونه‌ای تعیین می‌شوند که $\frac{a^2}{c^2}$ و $\frac{b^2}{c^2}$ به ترتیب برابر با تانژانت زاویه‌ی دهانه‌ی مخروط در تصویر آن بر صفحه‌ی XZ و YZ باشند.

فرم GQ معادله فوق به صورت زیر می‌باشد:

$$\frac{1}{a^2}x^2 + \frac{1}{b^2}y^2 - \frac{1}{c^2}z^2 - \frac{2x'}{a^2}x - \frac{2y'}{b^2}y + \frac{2z'}{c^2}z + \left(\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} - \frac{z'^2}{c^2} \right) = 0 \quad (۲۸-۶)$$

با توجه به مطالب ذکر شده در جدول زیر انواع سطوح پایه قابل تعریف به همراه پارامترهای مورد نیاز هر یک از آنها در کد MCTRAN آورده شده است.

جدول شماره ۱: سطوح پایه قابل تعریف در کد MCTTRAN

پارامترها	معادله سطح	توضیح	نشانهگر
$A B C D$	$Ax + By + Cz - D = 0$	حالت کلی صفحه	P
D	$x - D = 0$	صفحه دارای نرمال همسو محور X	PX
D	$y - D = 0$	صفحه دارای نرمال همسو محور Y	PY
D	$z - D = 0$	صفحه دارای نرمال همسو محور Z	PZ
R	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	کره با مرکز واقع بر مبدأ	SO
$x' y' z' R$	$(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2 - R^2 = 0$	حالت کلی کره	S
$x' R$	$(x - x')^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	کره با مرکز واقع بر محور X	SX

پارامترها	معادله سطح	توضیح	نشانگر
$y' R$	$x^2 + (y - y')^2 + z^2 - R^2 = 0$	کره با مرکز واقع بر محور Y	SY
$z' R$	$x^2 + y^2 + (z - z')^2 - R^2 = 0$	کره با مرکز واقع بر محور Z	SZ
$y' z' R$	$(y - y')^2 + (z - z')^2 - R^2 = 0$	استوانه موازی با محور X	CPX
$x' z' R$	$(x - x')^2 + (z - z')^2 - R^2 = 0$	استوانه موازی با محور Y	CPY
$x' y' R$	$(x - x')^2 + (y - y')^2 - R^2 = 0$	استوانه موازی با محور Z	CPZ
R	$z^2 + y^2 - R^2 = 0$	استوانه واقع بر محور X	CX
R	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$	استوانه واقع بر محور Y	CY
R	$x^2 + y^2 - R^2 = 0$	استوانه واقع بر محور Z	CZ
$A B C D E$ $F G H J K$	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz$ $+Fzx + Gx + Hy + Jz + K = 0$	سطح درجه دو عمومی	GQ

۶-۱-۵- بردار نرمال بر سطح در یک نقطه

برای محاسبه بردار نرمال بر سطح در یک نقطه از عملگر گرادیان استفاده می‌شود.

$$\vec{v} = \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \quad (۶-۲۹)$$

با اعمال این عملگر بر روی معادلات سطوح مختلف می‌توان نرمال بر سطح هر یک از آنها را بر حسب موقعیت (x, y, z) محاسبه کرد. به طور کلی هر سطح کل فضا را به دو نیم فضا تقسیم می‌کند. یعنی اگر سطح A با فرمول $f_A(x, y, z) = 0$ تعریف شده باشد، به عنوان یک تعریف، ناحیه‌ای از فضا که به ازای نقاط موجود در آن $f_A(x, y, z) > 0$ شود نسبت به سطح دارای علامت مثبت و ناحیه‌ای از فضا که به ازای نقاط موجود در آن $f_A(x, y, z) < 0$ شود نسبت به سطح دارای علامت منفی می‌باشند. در این کد سطوح به گونه‌ای تعریف شده‌اند که نیم فضای در جهت بردار نرمال سطح دارای علامت مثبت و نیم فضای در خلاف جهت بردار نرمال سطح دارای علامت منفی نسبت به سطح می‌باشند.

۶-۲- سلول

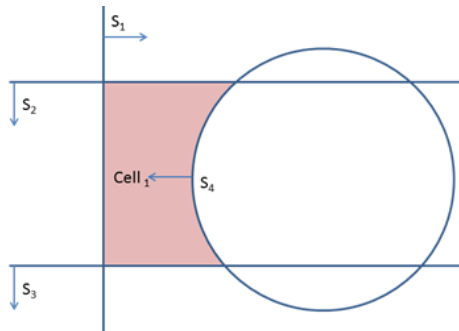
همانطور که اشاره شد در کد MCTTRAN از شیوهی موسوم به هندسه ترکیبی برای ساختن هندسه‌ی سه بعدی پیچیده و دلخواه استفاده می‌شود. در این روش، هندسه‌ی سیستم به صورت ترکیبی از سلول‌های همگن مجاور هم در نظر گرفته می‌شوند. هر سلول توسط یک و یا بیش از یک سطح محصور کننده تعریف می‌گردد. گام اول در تعریف سلول، تعریف سطوح محدودکننده آن می‌باشد. در بخش قبلی معادلات حاکم بر انواع این سطوح بیان شد. کاربر می‌تواند با مشخص کردن نوع سطح و ورود پارامترهای مناسب، هر یک از این سطوح را برای کد تعریف کند. بعد از تعریف شدن سطوح با توجه به موقعیت نقاط موجود در سلول می‌توان علامت سطوحی که محدوده یک سلول را تعریف می‌کنند مشخص کرد و با اعمال عملیات منطقی بین آنها محدوده سلول را تشکیل داد. سلول‌ها با توجه به عملگرهای منطقی بکارگیری شده در تعریفشان به دو دسته سلول‌های ساده و غیرساده (مرکب) تقسیم‌بندی می‌شوند، علت این تقسیم‌بندی تفاوت روند ردیابی نوترون در این دو نوع سلول می‌باشد.

عبارت منطقی توصیف کننده‌ی سلول حاوی عملگرها (اجتماع، اشتراک، متمم) و شماره علامت‌دار سطوح و پرانتز (جهت مشخص نمودن سلسله مراتب اجرای عملگرها) می‌باشد. عملگر متمم به دو صورت قابل استفاده است: یا قبل از شماره‌ی یک سلول قرار می‌گیرد و یا قبل از پرانتزی حاوی فهرستی از سطوح توصیف کننده‌ی سلول دیگر به کار می‌رود. اثر عملگر متمم بر یک عبارت، به معنای هر چیزی غیر از آن عبارت است. عملگر متمم هیچ قابلیت جدیدی افزون بر عملگرهای اجتماع و اشتراک فراهم نمی‌کند، بلکه با این عملگر صرفاً می‌توان به روش مختصرتری سلول را تعریف نمود. در واقع در مواردی که در تعریف سلول از عملگر متمم استفاده شده باشد، به طور ضمنی در کد برای تعریف سلول از عملگرهای اجتماع و اشتراک متناظر با عملگر متمم استفاده می‌گردد. باید به این نکات توجه داشت که در هنگام استفاده از عملگر متمم، ممکن است برخی شرایط ضروری برای محاسبه‌ی حجم سلول و مساحت سطوح در برخی حالات از بین برود. همچنین در استفاده از این عملگر، به علت برخی محاسبات اضافه در روند ردیابی نوترون، امکان افزایش زمان محاسبات نیز وجود دارد

۶-۲-۱- سلول‌های ساده

آن سلول‌هایی که صرفاً می‌توانند با استفاده از عملگر اشتراک و بدون استفاده از عملگر اجتماع و متمم تعریف شوند، سلول‌های ساده نامیده می‌شوند. اگر یک سلول صرفاً با استفاده از عملگرهای اشتراک تعریف شده باشد، تمام نقاط درون سلول نسبت به یک سطح محدود کننده معین دارای علامت یکسانی می‌باشند، یعنی برای هر سطح محدود کننده، تمام نقاط درون سلول فقط باید در یک طرف آن قرار داشته باشند. برای مثال در شکل (۱۸) یک سلول ساده به همراه سطوح محدودکننده و بردار نرمال آن‌ها نشان داده شده است. سلول یک را با توجه به سطوح و بردارهای نرمال آنها می‌توان بصورت زیر تعریف نمود.

$$\text{Cell 1} \rightarrow (+S_1) \cap (+S_2) \cap (-S_3) \cap (+S_4)$$



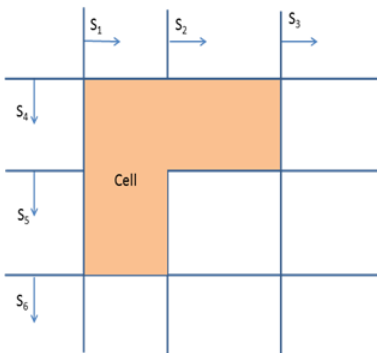
شکل ۱۸: سلول ساده به همراه سطوح محدودکننده آن

۶-۲-۲- سلول های مرکب

سلول هایی که تعریف آنها بدون استفاده از عملگر اجتماع امکان پذیر نباشد سلول های غیر ساده (مرکب) نامیده می شوند. مجاز بودن کاربر در استفاده از عملگر اجتماع در تعریف هندسه ی سیستم، یا عبارتی مجاز بودن کاربر به تعریف سلول مرکب، باعث ساده تر شدن تعریف هندسه ی سیستم می گردد. اما باید توجه داشت، استفاده از عملگر اجتماع در تعریف

سلول در کنار ساده تر شدن تعریف هندسه در ورودی کد، پیچیدگی هایی را با خود به همراه دارد. برای مثال در شکل (۱۹) یک سلول مرکب به همراه سطوح محدودکننده و بردار نرمال آن ها نشان داده شده است. این سلول را با توجه به سطوح و بردارهای نرمال آنها می توان بصورت زیر تعریف نمود.

$$\text{Cell 1} \rightarrow ((+S_1) \cap (-S_3) \cap (+S_4) \cap (-S_5)) \cup ((+S_1) \cap (-S_2) \cap (-S_6) \cap (+S_5))$$



شکل ۱۹: نمونه ای از سلول مرکب به همراه سطوح محدودکننده آن

با استفاده از عملگر اجتماع می توان سلول هایی با گوشه های مقعر (دارای زاویه بیش از ۱۸۰ درجه) و همچنین سلول هایی با قسمت های کاملاً گسسته تعریف نمود. وجود گوشه ی مقعر (با زاویه ی بیش از ۱۸۰ درجه) باعث می شود تا امکان حضور یک نوترون (یا نقطه) در دو طرف یک سطح در درون یک سلول وجود داشته باشد. بنابراین از این منطق که تمام نقاط داخل یک سلول نسبت به یک سطح سازنده ی سلول دارای علامت مشابه اند نمی توان برای تعیین مکان ذره استفاده نمود. از این رو منطق ردیابی نوترون در این نوع سلول ها کمی پیچیده تر است.

علی رغم اینکه با استفاده از عملگر اجتماع می توان یک هندسه ی بسیار بزرگ و پیچیده را صرفاً با استفاده از یک سلول تعریف نمود، اما در تعریف سلول باید با هوشیاری عمل نمود تا سلول هایی با پیچیدگی هندسی زیاد تعریف نشوند. توجه به این موضوع بسیار حائز اهمیت است چرا که برای ترابرد نوترون در هر طول پیمایش باید نقاط تقاطع خط سیر نوترون با هر سطح محدود کننده ی سلول محاسبه شود، بنابراین اگر سلول با استفاده از سطوح زیادی تعریف شده باشد این امر باعث انجام حجم محاسبات زیادی می گردد.

۶-۲-۳- عملیات سلول یابی

تعریف سلول یک عبارت منطقی است که با استفاده از سطوح علامت دار و عملگرهای اجتماع و یا اشتراک تشکیل می شود. نوترون برای حضور در یک سلول باید عبارت منطقی آن را ارضا کند. عملگرهای اجتماع و اشتراک، عملگرهای منطقی دودویی^{۱۱} هستند، بنابراین از روش جبر منطقی^{۱۲} تبعیت می کنند. لذا برای یافتن سلول حاوی نوترون باید عبارت های منطقی تمامی سلول های موجود در سیستم با توجه به مکان نوترون بررسی شوند. از آنجائی که محدوده یک سلول را سطوح محدود کننده آن مشخص می کنند، برای بررسی وجود و یا عدم وجود نوترون در هر سلول، باید موقعیت نوترون

 Binary Boolean Operators ۱۱

Boolean Algebra Methodology ۱۲

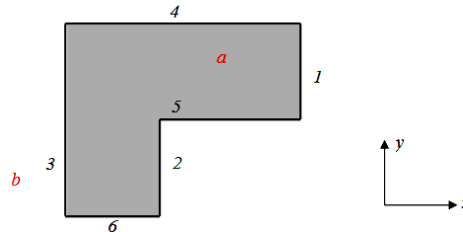
نسبت به تمام سطوح محدودکننده آن بررسی شود. این عمل با قرار دادن مکان نوترون (x, y, z) در رابطه مربوط به هر سطح $(f(x, y, z))$ و مقایسه علامت آن با علامتی که در تعریف سلول بکار برده شده است، انجام می‌شود.

از منظر سلسله مراتب اجرای عملگرها در یک عبارت منطقی، بدون رعایت هیچ ترتیبی از چپ به راست ابتدا اشتراک‌ها و سپس اجتماع‌ها انجام می‌شوند و در صورت حضور پرانتز در توصیف سلول، عبارات منطقی ابتدا از داخلی‌ترین پرانتز تا بیرونی‌ترین پرانتز انجام می‌پذیرد. در واقع از پرانتزها برای واضح شدن عملیات‌ها و همچنین در مواردی برای اعمال ترتیب خاصی از انجام عملیات‌ها استفاده می‌گردد.

برای روش شدن مفهوم عبارت منطقی، این مثال را در نظر می‌گیریم:

$$cell : (-1 - 4 5 3)U(-2 6 3 - 5)$$

تعریف سلول فوق (نشان داده شده در شکل ۲۰) در واقع یک عبارت منطقی برای محدوده‌ای از فضا است که نسبت به سطوح ۱ و ۴ دارای علامت منفی و نسبت به سطوح ۵ و ۳ دارای علامت مثبت است بعلاوه‌ی محدوده‌ای از فضا که نسبت به سطوح ۲ و ۵ دارای علامت منفی و نسبت به سطوح ۳ و ۶ دارای علامت مثبت است.



شکل ۲۰: یک سلول مرکب به همراه شماره سطوح آن

برای بررسی عبارت منطقی یک سلول برای یک ذره (حضور یا عدم حضور ذره در سلول) به این صورت عمل می‌شود:

- علامت مکان نوترون نسبت به هر یک از سطوح بکار رفته در تعریف سلول مشخص می‌گردد.

- اگر علامت بدست آمده نسبت به هر سطح با علامت به کار رفته آن سطح در تعریف سلول یکسان باشد عدد یک و در صورت مختلف بودن علامت، عدد صفر جایگزین شماره علامت دار سطح در تعریف سلول می شود.
- با در نظر گرفتن عملگر اشتراک به عنوان عملگر ضرب و عملگر اجتماع به عنوان عملگر جمع، حاصل عبارت منطقی سلول محاسبه می گردد.
- اگر حاصل عبارت صفر به دست آید یعنی ذره در سلول قرار نداشته و اگر عدد دیگری حاصل شود یعنی ذره در سلول قرار دارد.

به عنوان مثال عبارت منطقی سلول نشان داده شده در شکل ۲۰ را برای دو نقطه a و b بررسی می کنیم.

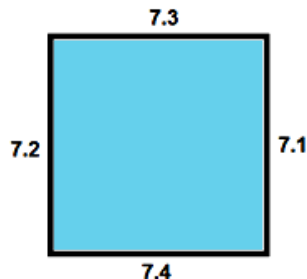
$$a \Rightarrow (1 \times 1 \times 1 \times 1) + (0 \times 1 \times 1 \times 0) = 1 + 0 = 1$$

$$b \Rightarrow (1 \times 1 \times 0 \times 0) + (1 \times 1 \times 0 \times 1) = 0$$

۶-۳- احجام هندسی یا سطوح بسته^{۱۳}

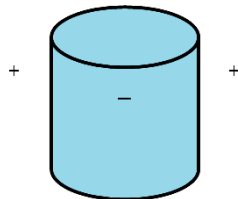
سطوح بسته در واقع یکی از انواع سطوح قابل تعریف در کد می باشد. سطح بسته شکل هندسی است که یک فضای فیزیکی را احاطه می کند و در واقع از اشتراک برخی سطوح پایه ساخته می شود. هیچ توانایی افزون بر آن چیزی که توسط سطوح پایه وجود دارد برای تعریف سلولها ایجاد نمی کنند، بلکه یک روش جایگزین برای تعریف سلولها و سطوح می باشد و صرفاً ورودی کد را مختصرتر و کم حجم تر می کنند، البته مختصر شدن ورودی کد به معنای ساده تر شدن فرآیند شبیه سازی هندسه ی سیستم نمی باشد بلکه یک سطح بسته تعریف شده توسط کاربر، به طور داخلی در زیرروالهای مربوطه به معادلات سطوح سازنده ی (رویهها) خود تجزیه و در قسمت هایی از تعریف سلول که از سطح بسته استفاده شده است به جای آن، رویه های مربوط به سطح بسته قرار داده می شود. با استفاده از قابلیت احجام هندسی می توان برخی اشکال اولیه

مانند مکعب‌ها، استوانه‌ها، منشورها و ... را به سادگی تعریف نمود. علاوه بر این با استفاده از عملگرهای منطقی و ترکیب این احجام هندسی می‌توان اشکال جدیدی نیز تولید نمود. رویه‌ها در تعریف سلول‌ها نیاز به شماره منحصر به فرد دارند. به این منظور رویه‌ها بر اساس یک ترتیب از قبل تعیین شده‌ای شماره‌گذاری می‌شوند. شماره‌های اختصاص داده شده به رویه‌های سازنده‌ی سطح بسته همان عدد انتخاب شده توسط کاربر برای سطح بسته است که بعد از آن یک ممیز اعشار و اعداد ۱ و ۲ و ... قرار می‌گیرد. به عنوان مثال در شکل ۲۱ این روش شماره‌گذاری نشان داده شده است.



شکل ۲۱: نمای دو بعدی از یک سطح بسته مکعب مستطیل که با شماره‌ی ۷ در ورودی کد تعریف شده است.

طبق تعریف، سطح بسته همانند دیگر سطوح پایه، فضا را به دو نیم فضا تقسیم می کند، به این صورت که فضای درون سطح بسته نسبت به آن دارای علامت منفی و فضای بیرون سطح بسته نسبت به آن دارای علامت مثبت است. همچنین در این زیرروال رویه ها به گونه ای تعریف می شوند تا فضای داخل یک سطح بسته نسبت به تمام رویه های آن دارای علامت منفی و نسبت به فضای بیرون سطح بسته دارای علامت مثبت باشد. باید توجه داشت که فضای داخل سطح بسته با اشتراک رویه های سازنده ی آن تعریف می شود لذا یک سلول ساده است، اما فضای بیرون احجام هندسی یک سلول مرکب است.



شکل ۲۲: تقسیم فضا به دو نیم فضا توسط یک سطح بسته

از رویه‌های سطح بسته نیز می‌توان به طور جداگانه در تعریف سلول‌های دیگر نیز استفاده نمود، البته باید به این نکته توجه داشت که علامت یک رویه توسط سلول اصلی که سطح بسته^{۱۴} در آن به کار رفته تعیین می‌گردد و اگر این رویه در توصیف سلول دیگری وجود داشته باشد باید علامت آن به طور صحیح به کار برده شود.

همچنین باید به این نکته توجه داشت که ممکن است در تجزیه سطح بسته به رویه‌ها یا به هر دلیل دیگری یک سطح با چند شماره متفاوت در کد تعریف شده باشد، در این صورت در کد شماره‌های تکراری حذف و هر سطحی تنها با یک شماره معرفی می‌گردد.

به طور کلی فرآیند زیرروال مربوطه بعد از مواجهه کد با دستور سطح بسته به شرح زیر می‌باشد.

۱. در گام اول سطح بسته بر حسب رویه‌های سازنده‌اش بازنویسی می‌شود: معادلات رویه‌ها به گونه‌ای بیان می‌شود که نرمال رویه‌ها به سمت فضای بیرون حجم ساخته شده توسط احجام هندسی باشد تا فضای داخل سطح بسته نسبت به هر رویه دارای علامت منفی باشد.

۲. رویه‌ها در قسمت تعریف سلول جایگذاری می‌شوند.

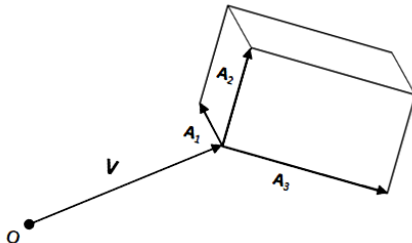
۳. سطوح تکراری حذف می‌شوند.

سطوح بسته قابل تعریف در کد عبارتند از:

- متوازی‌السطوح با جهت‌گیری دلخواه در فضا که با کلیدواژه AOP در کد شناخته می‌شود.
- مکعب مستطیل با رویه‌های عمود بر محورهای مختصات که با کلیدواژه RPP در کد شناخته می‌شود.
- استوانه‌ی قائم دوآر که با کلیدواژه CYL در کد شناخته می‌شود.
- منشوری با قاعده‌ی شش گوشه‌ای که با کلیدواژه HEX در کد شناخته می‌شود.

۶-۳-۱- متوازی‌السطوح با جهت‌گیری دلخواه

یک متوازی‌السطوح با جهت‌گیری دلخواه (AOP) در فضا در شکل ۲۳ نشان داده شده است. با معین بودن فاصله‌ی یک رأس متوازی‌السطوح تا مبدأ مختصات (گوشه) و همچنین با مشخص بودن سه بردار نشان‌دهنده‌ی فاصله از گوشه تا سه رأس مجاورش، متوازی‌السطوح به طور کامل مشخص می‌گردد. متوازی‌السطوح لزوماً دارای زوایای داخلی قائمه نمی‌باشد، تنها شرط برای سه بردار A_1, A_2, A_3 این است که نباید در یک صفحه قرار داشته باشند.



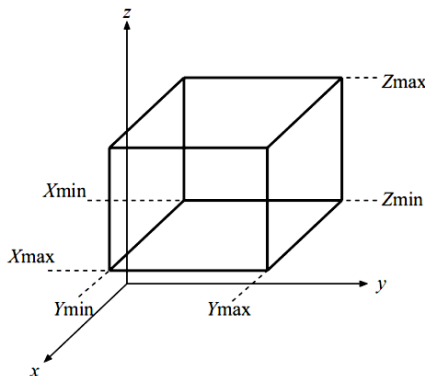
شکل ۲۳: تعریف سطح بسته‌ی AOP با استفاده از چهار بردار A_1, A_2, A_3, V

جدول شماره ۲: رویه‌های محصور کننده‌ی سطح بسته‌ی AOP با شماره‌ی a به ترتیب نامگذاری در کد

شماره‌ی رویه	توضیحات مربوط به صفحه
a.1	صفحه‌ای با بردار نرمال $A_2 \times A_3$ و نقطه‌ی انتهای بردار (A_1+V) به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.2	صفحه‌ای با بردار نرمال $A_2 \times A_3$ - و نقطه‌ی ابتدای بردار A_1 به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.3	صفحه‌ای با بردار نرمال $A_3 \times A_1$ و نقطه‌ی انتهای بردار (A_2+V) به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.4	صفحه‌ای با بردار نرمال $A_3 \times A_1$ - و نقطه‌ی ابتدای بردار A_2 به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.5	صفحه‌ای با بردار نرمال $A_1 \times A_2$ و نقطه‌ی انتهای بردار (A_3+V) به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.6	صفحه‌ای با بردار نرمال $A_1 \times A_2$ - و نقطه‌ی ابتدای بردار A_3 به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.

۶-۳-۲- مکعب مستطیل با رویه‌های عمود بر محورهای مختصات

یک مکعب مستطیل با رویه‌های عمود بر محورهای مختصات (RPP) در شکل ۲۴ نشان داده شده است. چنین مکعب مستطیلی صرفاً با معلوم بودن نقاط تقاطع وجوه آن با محورهای مختصات کاملاً مشخص می‌شود.



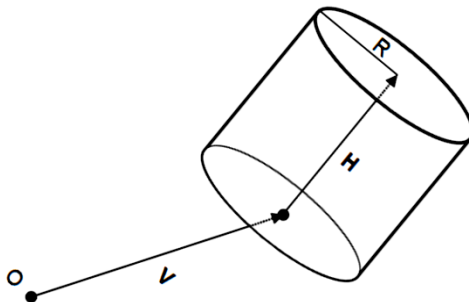
شکل ۲۴: تعریف سطح بسته‌ی RPP با استفاده از شش مختصه‌ی X_{min} , X_{max} , Y_{min} , Y_{max} , Z_{min} , Z_{max}

جدول شماره ۳: رویه‌های محصور کننده‌ی سطح بسته‌ی RPP با شماره‌ی a به ترتیب نامگذاری در کد

شماره‌ی رویه	توضیحات مربوط به صفحه
a.1	صفحه‌ای با بردار نرمال \hat{i} و نقطه‌ی X_{max} به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.2	صفحه‌ای با بردار نرمال $-\hat{i}$ و نقطه‌ی X_{min} به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.3	صفحه‌ای با بردار نرمال \hat{j} و نقطه‌ی Y_{max} به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.4	صفحه‌ای با بردار نرمال $-\hat{j}$ و نقطه‌ی Y_{min} به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.5	صفحه‌ای با بردار نرمال \hat{k} و نقطه‌ی Z_{max} به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.6	صفحه‌ای با بردار نرمال $-\hat{k}$ و نقطه‌ی Z_{min} به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.

۶-۳-۳- استوانه قائم مدور

یک استوانه‌ی قائم دوّار (CYL) در شکل ۲۵ نشان داده شده است. یک استوانه با قاعده‌ی دایره‌ای و با جهت‌گیری خاص در فضا با مشخص بودن شعاع قاعده (R) و دو بردار که یکی نشان‌دهنده‌ی مکان مرکز قاعده‌ی پایین استوانه (V) و دیگری نشان‌دهنده‌ی محور استوانه (H) است، تعریف می‌گردد.



شکل ۲۵: تعریف سطح بسته‌ی CYL با استفاده از دو بردار V و H و شعاع R

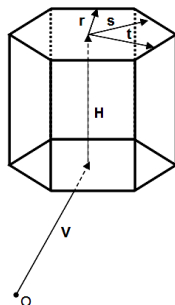
جدول شماره ۴: رویه‌های محصور کننده‌ی سطح بسته‌ی CYL با شماره‌ی a به ترتیب نامگذاری در کد

توضیحات مربوط به صفحه	شماره‌ی رویه
رویه‌ی استوانه‌ای با شعاع R، با بردار محور استوانه (H) و نقطه‌ی انتهای بردار V به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر محور استوانه. نرمال رویه باید به سمت فضای بیرون رویه باشد.	a.1
صفحه‌ی قاعده‌ی بالایی با بردار نرمال H و نقطه‌ی انتهای بردار (V+H) به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.	a.2
صفحه‌ی قاعده‌ی پایینی با بردار نرمال -H و نقطه‌ی انتهای بردار V به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.	a.3

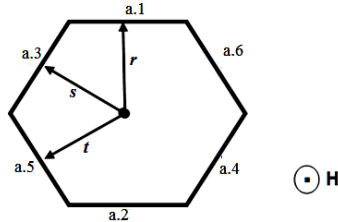
۶-۳-۴- منشور قائم با قاعده شش ضلعی منتظم

منشور با قاعده شش ضلعی منتظم (HEX) یک سطح بسته با هشت رویه (شش رویه‌ی جانبی و دو رویه به عنوان قاعده منشور) می‌باشد. به عنوان مثال یک منشور قائم با قاعده شش ضلعی در شکل ۲۶ نشان داده شده است. منشور قائم با قاعده شش ضلعی منتظم با استفاده از سه بردار تعریف می‌شود. این سه بردار عبارتند از بردار V نشان‌دهنده‌ی مرکز قاعده‌ی

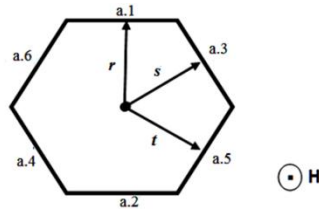
پایین منشور، بردار H نشان‌دهنده‌ی محور منشور از مرکز قاعده‌ی پایین تا مرکز قاعده‌ی بالای منشور و بردار r از محور منشور تا وسط رویه‌ی اول. برای تعریف هر هشت رویه منشور نیاز به دو بردار s و t علاوه بر سه بردار ذکر شده وجود دارد. در کد دو بردار s و t با دوران پادساعت‌گرد یا ساعتگرد بردار r به ترتیب به اندازه‌ی 60° و 120° درجه حول بردار H بدست می‌آیند. رویه‌های عمود بر سه بردار r و s و t بر اساس آن چیزی که در شکل ۲۷ و یا ۲۸ نشان داده شده است نامگذاری می‌شوند.



شکل ۲۶: تعریف سطح بسته‌ی HEX با استفاده از پنج بردار v, H, r, s و t



شکل ۲۷: ترتیب نام‌گذاری رویه‌های یک منشور قاعده شش ضلعی منتظم با شماره a در حالت دوران پادساعتگرد



شکل ۲۸: ترتیب نام‌گذاری رویه‌های یک منشور قاعده شش ضلعی منتظم با شماره a در حالت دوران ساعتگرد

جدول شماره ۵: رویه‌های محصور کننده‌ی سطح بسته‌ی HEX با شماره‌ی a به ترتیب نامگذاری در کد

شماره‌ی رویه	توضیحات مربوط به صفحه
a.1	صفحه‌ای با بردار نرمال \hat{r} و نقطه‌ی انتهایی بردار $V+H+\hat{r}$ به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.2	صفحه‌ای با بردار نرمال $-\hat{r}$ و نقطه‌ی انتهایی بردار $V+H-\hat{r}$ به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.3	صفحه‌ای با بردار نرمال \hat{s} و نقطه‌ی انتهایی بردار $V+H+\hat{s}$ به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.4	صفحه‌ای با بردار نرمال $-\hat{s}$ و نقطه‌ی انتهایی بردار $V+H-\hat{s}$ به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.5	صفحه‌ای با بردار نرمال \hat{t} و نقطه‌ی انتهایی بردار $V+H+\hat{t}$ به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.6	صفحه‌ای با بردار نرمال $-\hat{t}$ و نقطه‌ی انتهایی بردار $V+H-\hat{t}$ به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.7	صفحه‌ای با بردار نرمال \hat{H} و نقطه‌ی انتهایی بردار $V+H$ به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.
a.8	صفحه‌ای با بردار نرمال $-\hat{H}$ و نقطه‌ی انتهایی بردار V به عنوان نقطه‌ی دلخواه واقع بر آن.

۴-۶- فاصله جهت‌دار^{۱۵} نوترون از مرز سلول

یکی از محاسبات هندسی مهم در روند شبیه‌سازی، محاسبه فاصله جهت‌دار نوترون تا مرز سلول می‌باشد. با محاسبه این فاصله می‌توان در مورد عبور و یا عدم عبور نوترون از سلول تصمیم‌گیری کرد. همانطور که پیشتر گفته شد، مرز یک سلول را سطوح محدودکننده آن مشخص می‌کنند، بنابراین فاصله جهت‌دار یک نوترون تا مرز یک سلول با محاسبه فاصله جهت‌دار نوترون تا هر یک از این سطوح، قابل محاسبه است.

معادله‌ی پارامتری خط سیر نوترونی واقع در مکان اولیه \vec{r}_0 که در راستای $\vec{\Omega}$ در حال حرکت است، به صورت رابطه‌ی زیر قابل بیان می‌باشد.

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{\Omega} d \quad (۳۰-۶)$$

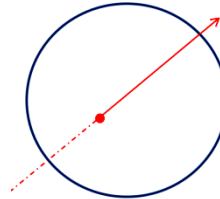
directed distance ۱۵

- بردار مکان نوترون: $\vec{r} = (x, y, z)$

- بردار مکان اولیه نوترون: $\vec{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$

- بردار جهت حرکت نوترون: $\vec{\Omega} = (u, v, w)$

فاصله‌ی جهت‌دار نوترون تا هر سطح (d)، از تقاطع معادله‌ی خط سیر نوترون با معادله‌ی سطح مورد نظر بدست می‌آید. مقدار مثبت d نشان‌دهنده‌ی حرکت در جهت $\vec{\Omega}$ و مقدار منفی، نشان‌دهنده‌ی حرکت نوترون در خلاف جهت $\vec{\Omega}$ می‌باشد.



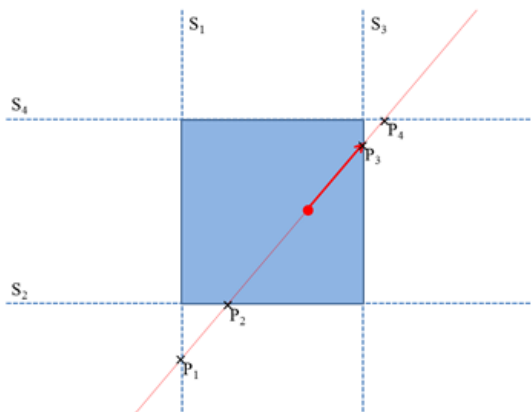
شکل ۲۹: فاصله جهت‌دار نوترون تا یک سطح

اگر سطح مورد بررسی با رابطه $f(x, y, z) = 0$ بیان شود، معادله تقاطع سطح و خط سیر نوترون را می توان بصورت زیر بیان کرد.

$$f(x_0 + u d, y_0 + v d, z_0 + w d) = 0 \quad (۳۱-۶)$$

در این رابطه تمام مقادیر به جز مقدار d معلوم بوده و درجه معادله برحسب d با درجه سطح مورد بررسی برابر است. خط سیر و سطح مورد بررسی ممکن است اصلاً تقاطع نداشته و یا در چند نقطه تقاطع داشته باشند، تعداد نقاط تقاطع را تعداد جواب های حقیقی معادله (۳۱-۶) مشخص می کند.

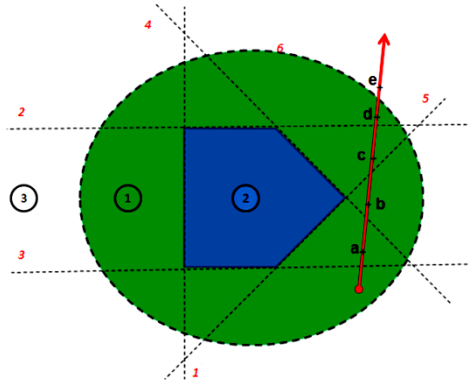
برای مثال در شکل ۳۰ تقاطع خط سیر نوترون با سطوح محدودکننده یک سلول نشان داده شده است. برای هر سطح، محل برخورد با نماد P نشان داده شده است. نقاط P_1 و P_2 بدلیل منفی بودن فاصله جهت دار حذف می شوند، نقاط P_3 و P_4 مثبت هستند ولی نقطه P_3 بدلیل نزدیک تر بودن بعنوان نقطه برخورد اصلی نوترون با مرز سلول انتخاب می شود.



شکل ۳۰: کوتاه‌ترین فاصله جهت‌دار یک نقطه از مرز سلول

در سلول‌های ساده مانند شکل ۳۰، فاصله‌ی جهت‌دار نوترون تا مرز خارجی سلول برابر است با کوچک‌ترین فاصله‌ی مثبت نوترون با سطوح سازنده‌ی سلول. اما اگر از این منطق برای سلول‌های مرکب نظیر سلول ۱ نشان داده شده در شکل ۳۱ استفاده شود، ممکن است جواب نادرستی بدست آید. در واقع در سلول مرکب نشان داده شده در شکل ۳۱ در روند

محاسبه‌ی فاصله‌ی ذره تا مرز سلول، فاصله‌ی ذره با سطوح مشخص شده با نقطه‌چین (بخشی از یک سطح که جزء مرز واقعی سلول محسوب نمی‌شود) نیز محاسبه شده و باعث ایجاد خطا در نتیجه می‌شود. برای رفع این مشکل باید با استفاده از این واقعیت که در طرفین نقاط تقاطع غیر مرزی سلول یکسانی وجود دارد، جواب‌های نادرست را حذف نمود.



شکل ۳۱: نمونه‌ای از بروز خطا در ردیابی ذره در سلول مرکب

در شکل ۳۱ سلول‌های ۱، ۲ و ۳ نشان داده شده است. سلول ۲ و ۳ سلول‌های ساده‌اند اما سلول ۱ با عملگر اجتماع به صورت زیر تعریف می‌گردد لذا یک سلول مرکب است.

$$\text{cell 2: } (+5 U +4 U +2 U -1 U -3) - 6$$

در سلول‌های مرکب بعد از محاسبه‌ی فاصله‌های جهت‌دار نوترون تا تمامی سطوح سازنده‌ی سلول، (همانند روند محاسبه فاصله‌ی جهت‌دار با سلول‌های ساده) مقادیر منفی حذف می‌شود اما بر خلاف سلول ساده لزوماً کوچک‌ترین مقدار مثبت در میان مقادیر محاسبه شده جواب صحیح نمی‌باشد. همانطور که در شکل مشاهده می‌شود، در این مثال نوترون در مسیر حرکتش به ترتیب با سطوح ۶، ۲، ۵، ۴، ۳ برخورد می‌کند که تنها بعد از برخورد با سطح ۶ از سلول خارج می‌شود. به عبارتی بعد از برخورد با سطوح ۲، ۵، ۴، ۳ نوترون همچنان درون سلول باقی می‌ماند. همانطور که اشاره شد، اگر نوترون با یکی از سطوح سازنده‌ی سلول در مرز داخلی سلول (مرز غیر واقعی سلول) برخورد کند نوترون از سلول خارج نمی‌شود، لذا اگر نقطه‌ای در راستای حرکت نوترون کمی فراتر از نقطه برخورد با مرز غیر واقعی در نظر گرفته شود آن نقطه نیز

درون سلول قرار خواهد داشت، به بیان دیگر عبارت منطقی سلول برای این نقطه نیز برقرار می‌باشد. همان‌گونه که در شکل ۳۱ مشاهده می‌شود، علامت نقطه‌ی a نسبت به تمام سطوح مشابه علامت نقطه مکان اولیه نوترون است جز نسبت به سطح ۳، همچنین علامت نقطه‌ی b نسبت به تمام سطوح مشابه علامت نقطه‌ی a است جز با سطح ۴ و برای نقاط دیگر به همین ترتیب.

راه عملی و قابل پیاده‌سازی برای بررسی برخورد نوترون با مرز خارجی سلول به صورت زیر می‌باشد:

۱. نقاط تقاطع مثبت و سطوح متناظرشان از کوچک به بزرگ مرتب می‌شوند.
۲. کوچک‌ترین فاصله تا نقطه مرزی و شماره سطح متناظرش انتخاب می‌شود. ($d_{min} = d_n$ و $S_n = n$; $n = 1$)
۳. در کل عبارت منطقی سلول به ازای مکان اولیه نوترون، مقدار مربوط به سطح n تغییر داده می‌شود، به این صورت که اگر مقدارش صفر بود تبدیل به یک و اگر مقدارش یک بود تبدیل به صفر می‌گردد.

۴. اگر عبارت منطقی بدست آمده در مرحله قبل برابر صفر بدست آید یعنی نقطه‌ی برخورد، مرز خارجی است و لذا فاصله انتخاب شده به عنوان فاصله‌ی جهت‌دار انتخاب می‌شود در غیر این صورت مرحله بعد پیگیری می‌شود.^{۱۶}
۵. فاصله بعدی تا نقطه مرزی و شماره سطح متناظرش انتخاب می‌شود. $d_{min} = d_{n+1}$ و $S_{n+1} = n + 1$
۶. در کل عبارت منطقی سلول بدست آمده در مرحله قبل^{۱۷}، مقدار مربوط به سطح $n+1$ تغییر داده می‌شود، به این صورت که اگر مقدارشان صفر بود تبدیل به یک و اگر مقدارشان یک بود تبدیل به صفر گردد.
۷. اگر عبارت منطقی بدست آمده در مرحله قبل برابر صفر بدست آید یعنی نقطه‌ی برخورد، مرز خارجی است و لذا فاصله انتخاب شده به عنوان فاصله‌ی جهت‌دار انتخاب می‌شود در غیر این صورت مرحله ۵ پیگیری می‌شود.

۱۶ عبارت منطقی بدست آمده مربوط به نقطه‌ای، کمی فراتر از نقطه‌ی تقاطع است.

۱۷ عبارت منطقی بدست آمده مربوط به نقطه‌ای، کمی فراتر از نقطه‌ی تقاطع قبلی است.

۶-۵- ردیابی^{۱۸} نوترون در سیستم

پس از یافتن سلول حاوی نوترون، ترابرد ذره با نمونه برداری طول پیمایش تا مکان برخورد با استفاده از خواص ماده پرکننده این سلول شروع می شود. از آنجایی که با عبور از مرز سلول ممکن است خواص فیزیکی تغییر یابد، طول پیمایش با نزدیک ترین فاصله جهت دار تا مرز مقایسه و عبور ذره با این طول پیمایش از مرز بررسی می شود.

اگر محیطی که نوترون در آن ترابرد انجام می دهد همگن و نامحدود باشد، آنگاه احتمال اینکه نوترون در بازه ds حول فاصله S از مکان فعلی خود (r_0) وارد واکنش شود، به صورت رابطه ی (۶-۳۲) بیان می شود.

$$f(s)ds = e^{-\Sigma_t(E)S} \Sigma_t(E)ds \xrightarrow{\text{در حالت چند گروهی}} f(s)ds = e^{-\Sigma_{tg}S} \Sigma_{tg}ds \quad (۶-۳۲)$$

بنابراین برای بدست آوردن فاصله تصادفی که ذره قبل از برخورد طی می کند از تابع توزیع $f(s)$ نمونه برداری می شود. با به کار بردن روش معکوس تابع توزیع تجمعی یا همان روش مستقیم نگاشت، رابطه ی (۶-۷۱) برای مسافت تصادفی ذره قبل از وقوع اندرکنش بدست می آید.

$$S = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \xi) \quad ; \quad \xi \sim U(0,1) \quad (۶-۳۳)$$

در رابطه ی (۶-۳۳)، ξ یک عدد تصادفی با توزیع یکنواخت بین صفر و یک می باشد. از آنجایی که $1 - \xi$ نیز دارای توزیع یکنواخت بین صفر و یک می باشد، لذا می توان رابطه ی (۶-۳۳) را به صورت رابطه ی (۶-۳۴) بازنویسی نمود.

$$S = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(\xi) \quad (۶-۳۴)$$

بنابراین بردار مکان جدید (\mathbf{r}) نوترون که از مکان \mathbf{r}_0 در راستای $\mathbf{\Omega} = (u, v, w)$ مسافت S را طی کرده است، با رابطه‌ی (۳۵-۶) بیان می‌گردد.

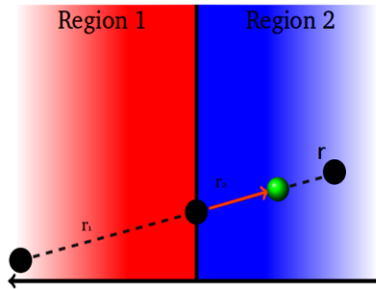
$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + S\mathbf{\Omega} ; \quad x = x_0 + Su, \quad y = y_0 + Sv, \quad z = z_0 + Sw \quad (۳۵-۶)$$

اما در مواجهه با سیستم‌های واقعی که متشکل از چندین سلول با خواص مختلف هستند روند کمی متفاوت می‌باشد. در این حالت نیز سطح مقطع کل، در طول مسیر حرکت ذره در درون یک سلول ثابت می‌باشد. بنابراین احتمال اینکه یک ذره در سلولی با سطح مقطع ماکروسکوپی کل Σ_t در بازه ds حول فاصله‌ی s از مکان فعلی خود r_0 برخورد کند، به صورت رابطه‌ی (۳۲-۶) می‌باشد. لذا رابطه‌ی (۳۴-۶) برای مسافت تصادفی ذره قبل از اندرکنش در درون سلول برقرار می‌باشد. تفاوت نمونه‌برداری در یک محیط غیر همگن با محیط همگن نامحدود به صورت زیر می‌باشد.

اگر S از فاصله‌ی جهت‌دار ذره تا مرز سلول جاری (d) کوچک‌تر باشد، آنگاه مکان ذره همانند روش نمونه برداری در محیط همگن نامحدود به نقطه‌ی برخورد منتقل شده ($r = r_0 + S\Omega$) و فیزیک فرآیند در نقطه‌ی برخورد شبیه‌سازی می‌شود. اما اگر S از فاصله‌ی جهت‌دار ذره تا مرز سلول جاری بزرگ‌تر باشد، با منتقل نمودن ذره به مکان جدید، شبیه‌سازی با اشتباه همراه می‌شود زیرا به علت ناهمگن بودن سیستم، تابع توزیع در هر سلول تغییر می‌کند، و لذا آن مقداری از S که درون سلول دیگری واقع شده، از تابع توزیع مناسبی نمونه برداری نشده است. بنابراین روش نمونه‌برداری باید اصلاح گردد.

به عنوان مثال مطابق شکل ۳۲ برای ذره‌ای که از سلول ۱ به سمت سلول ۲ حرکت می‌کند، فاصله تا نقطه‌ی برخورد (r) بزرگ‌تر از فاصله‌ی ذره تا مرز سلول می‌باشد، یعنی ذره از مرز عبور نموده است، لذا این فاصله اشتباه بوده و باید اصلاح شود، زیرا این فاصله با استفاده از تابع توزیع نادرست ($e^{-\Sigma_{t1}S}$) بدست آمده است.

در اینجا به دو روش برای اصلاح روش نمونه‌برداری اشاره می‌شود.



شکل ۳۲: اصلاح نمونه برداری نقطه‌ی برخورد برای ذره‌ای که از مرز سلول عبور کرده است

• ردیابی عادی^{۱۹}

در این روش مکان ذره به روی مرز انتقال داده می‌شود اما در این نقطه، فیزیک برخورد مدل نمی‌شود و شماره‌ی سلول به شماره‌ی سلولی که ذره وارد آن خواهد شد تغییر می‌کند. سپس با استفاده از سطح مقطع سلول جدید مجدداً فاصله مکان

جدید ذره تا نقطه‌ی برخورد در سلول جدید ($r_2 = -\ln(\xi)/\Sigma_{t2}$) نمونه‌برداری می‌شود. این کار تا زمانی که برخورد رخ دهد ادامه می‌یابد. لذا اگر تعداد سلول‌هایی که ذره قبل از برخورد سپری می‌کند زیاد باشد، فرآیند شبیه‌سازی پرهزینه و کم بازده می‌گردد.

- ردیابی ذره بر اساس مسافت آزاد میانگین

در این روش آن مقداری از مسافت طی شده در محیط ۲ که با استفاده از سطح مقطع محیط ۱ در نمونه‌برداری نقطه‌ی برخورد بدست آمده است، با روش قیاس مسافت آزاد میانگین (رابطه‌ی (۳۶-۶)) در این دو ناحیه اصلاح می‌شود، زیرا مسافت آزاد میانگین مستقل از نوع محیط می‌باشد. (اگر از چند ناحیه گذشته باشد، باید سهم آنها را هم قیاس نمود)

$$\Sigma_{t1} \times (r - r_1) \equiv \Sigma_{t2} r_2 \quad \rightarrow \quad r_2 = \frac{\Sigma_{t1}}{\Sigma_{t2}} (r - r_1) \quad (۳۶-۶)$$

همانطور که انتظار می‌رود احتمال وقوع واکنش در فاصله‌ی $r_1 + r_2$ با هر دو روش ذکر شده یکسان می‌باشد.

$$\text{روش اول: } p(r_1 + r_2) = e^{-\Sigma_{t1}r_1} \Sigma_{t2} e^{-\Sigma_{t2}r_2}$$

$$\text{روش دوم: } p(r_1 + r_2) = \Sigma_{t2} e^{-\Sigma_{t1}r} = \Sigma_{t2} e^{-\Sigma_{t1}(r_1 + \frac{\Sigma_{t2}}{\Sigma_{t1}}r_2)} = e^{-\Sigma_{t1}r_1} \Sigma_{t2} e^{-\Sigma_{t2}r_2}$$

این روش نسبت به روش قبل نیاز به تولید عدد تصادفی کمتری دارد لذا در کد MCTRAN از این روش استفاده شده است.

۶-۶- شرایط مرزی سطوح

در این بخش به نحوه‌ی مدل‌سازی شرایط مرزی مختلف در کد MCTRAN پرداخته شده است. استفاده از شرایط مرزی در شبیه‌سازی ترابرد نوترون علاوه بر قابلیت تعریف شرایط فیزیکی مختلف می‌تواند در تعریف هندسه و حافظه مورد

استفاده کد موثر باشد و در برخی موارد سبب بالا رفتن دقت محاسبات و کاهش واریانس شود. در صورتی که ذره به یک سطح برخورد کند با توجه به نوع شرط مرزی مربوط به سطح، ترابرد ذره دنبال می‌شود. برای یک سطح می‌توان یکی از چهار نوع شرط مرزی (مرز عادی، مرز بازتابنده^{۲۰}، مرز سفید^{۲۱}، مرز متناوب^{۲۲}) را در نظر گرفت. استفاده از شرایط مرزی می‌تواند در شبیه سازی دقیق فیزیک مسئله و یا ساده سازی آن مفید باشد. در برخی از موارد با استفاده از شرایط مرزی مناسب می‌تواند تا چندین برابر در تعریف هندسه و حافظه مورد نیاز صرفه جویی کرد. باید توجه داشت که استفاده از شرایط مرزی در کدهای مونت کارلو بر خلاف کدهای یقینی بدلیل برخی محاسبات اضافی، زمان اجرا را کمی افزایش

۲۰ Reflective boundary

۲۱ White boundary

۲۲ Periodic boundary

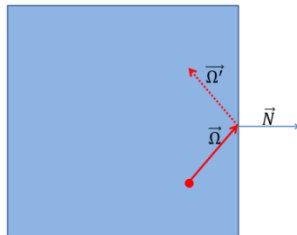
می دهد (در کدهای یقینی به دلیل کوچک شدن دستگاه معادلات زمان اجرا کد کاهش می یابد) ولی می تواند کاهش محسوسی در واریانس پارامترهای وابسته به مکان، همانند شار و جریان داشته باشد.

۶-۶-۱- مرز عادی

در این نوع مرز تغییری در وضعیت ذره رخ نمی دهد و پس از ثبت مقادیر اندازه گیری شده (همانند شار سطحی و جریان)، ذره به سلول بعدی انتقال داده می شود و اگر سلول همسایه ای وجود نداشته باشد (مرز خارجی) ذره نابود می شود. نکته ای که باید به آن اشاره شود این است که اگر ناحیه ای از فضا با استفاده از سلول تعریف نشده باشد، به معنای اهمیت صفر آن ناحیه برای ترابرد نوترون می باشد، لذا نوترون به محض رسیدن به ناحیه تعریف نشده نابود می گردد.

۶-۶-۲- مرز بازتابنده

هرگاه ذره‌ای به یک سطح بازتابنده برخورد کند، این سطح همانند آینه عمل کرده و پس از انتقال ذره به روی سطح، جهت حرکت آن را با همان زاویه‌ی فرود منعکس می‌کند. استفاده از صفحات بازتابنده می‌تواند باعث ساده‌تر شدن هندسه‌ی مسئله و کاهش واریانس شود. شکل (۳۳)، راستای جدید ذره را در برخورد با یک مرز بازتابنده نشان می‌دهد.



شکل ۳۳: مدل‌سازی برخورد ذره با مرز بازتابنده

در این نوع مرز ابتدا بردار نرمال به سطح مشخص می‌شود، سپس با استفاده از رابطه زیر جهت جدید ذره پس از برخورد با سطح بازتابنده تعیین می‌گردد:

$$\vec{\Omega}' = \vec{\Omega} - 2(\vec{N} \cdot \vec{\Omega})\vec{N} \quad (37-6)$$

در رابطه (37-6) بردار $\vec{\Omega}$ بردار یکه سرعت (u, v, w) ، که جهت حرکت ذره را تعیین می‌کند، و \vec{N} بردار یکه نرمال بر سطح عبوری (N_1, N_2, N_3) می‌باشد. مکان ذره نیز با استفاده از فاصله جهت‌دار محاسبه شده به روی سطح انتقال داده شده و سطح بازتابنده بعنوان آخرین سطح برخوردی در ترابرد ذخیره می‌شود.

۳-۶-۶- مرز سفید

هرگاه ذره‌ای به یک سطح سفید برخورد کند این سطح، ذره را با شار همسانگرد به سیستم بر می‌گرداند. زاویه ذره‌های

برگردانده شده از زاویه نوترون فرودی مستقل بوده و از توزیع احتمال $p(\mu) = 2\mu$ نمونه برداری می شود (که در آن μ کسینوس زاویه ی ذره برگشتی نسبت به بردار عمود بر سطح است). برای نمونه برداری از این تابع توزیع می توان از روش معکوس استفاده کرد:

$$\int_0^{\mu} p(\mu') d\mu' = \xi$$

$$\int_0^{\mu} 2\mu' d\mu' = \xi \quad (38-6)$$

$$\mu = \sqrt{\xi}$$

بنابراین با استفاده از یک عدد تصادفی و رابطه (38-6) می توان کسینوس زاویه ی ذره برگشتی نسبت به بردار عمود بر سطح (μ) را نمونه برداری کرد. با دوران بردار نرمال (N_1, N_2, N_3) با توجه به μ و انتخاب همسانگرد زاویه سمتی می توان جهت جدید نوترون را محاسبه کرد. با استفاده از دو عدد تصادفی ξ_1 و ξ_2 با توزیع یکنواخت در بازه ی -1 و $+1$ و شرط

پذیرش $\xi_1^2 + \xi_2^2 \leq 1$ راستای حرکت نوترون با رابطه‌ی زیر بدست می‌آید.

$$u' = N_1\mu + \sqrt{1 - \mu^2}(N_3 N_1 \xi_1 - N_2\xi_2) / \sqrt{(\xi_1^2 + \xi_2^2)(1 - N_3^2)}$$

$$v' = N_2\mu + \sqrt{1 - \mu^2}(N_3 N_2 \xi_1 + N_1\xi_2) / \sqrt{(\xi_1^2 + \xi_2^2)(1 - N_3^2)} \quad (۳۹-۶)$$

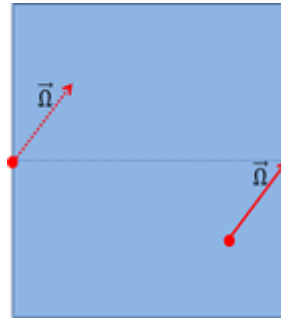
$$w' = N_3\mu - \xi_1\sqrt{(1 - N_3^2)(1 - \mu^2)} / \sqrt{(\xi_1^2 + \xi_2^2)}$$

مکان ذره نیز، مشابه با مرز بازتابنده، با استفاده از فاصله جهت‌دار محاسبه شده به روی سطح انتقال داده شده و سطح بازتابنده بعنوان آخرین سطح برخوردی در ترابرد ذخیره می‌شود.

۶-۶-۴- مرز متناوب

مرز متناوب تنها برای صفحات تخت قابل تعریف است و باید صفحه متناظری موازی با آن مشخص شود. هرگاه ذره‌ای به

یکی از این دو سطح برخورد کند بدون تغییر جهت از صفحه متناظر با آن خارج می‌شود. شکل (۳۴)، عملکرد این نوع سطح را در اثر برخورد ذره نشان می‌دهد.



شکل ۳۴: مدل سازی برخورد ذره با مرز متناوب

در این نوع مرز جهت حرکت ذره بی تغییر می‌ماند و مکان آن با استفاده از بردار نرمال صفحه و فاصله دو صفحه متناظر، به روی صفحه متناظر انتقال داده می‌شود. سطح متناظر بعنوان آخرین سطح برخوردی در ترابرد ذخیره می‌شود.

۶-۷- ساختارهای تکرار شونده

قابلیت تعریف هندسه‌های تکرار شونده، کاربرد زیادی در تعریف هندسه برای انجام محاسبات بحرانیت مربوط به قلب راکتورهای هسته‌ای دارد. هندسه‌های تکرار شونده با استفاده از شبکه‌ای از سلول‌های واحد^{۲۳} با چیدمان مشخص تعریف می‌شوند و به جای تعریف تک تک سلول‌ها، تنها سلول‌های واحد و نحوه چیدمان آنها مشخص می‌شود. این قابلیت باعث آسان شدن تعریف و تغییر در هندسه‌های پیچیده‌ای همانند قلب راکتورهای هسته‌ای می‌شود، که علاوه بر کاهش حافظه مورد نیاز، کاهش خطای کاربر در تعریف آن را نیز در پی خواهد داشت. برای پیاده سازی این قابلیت از تعریف سلول‌های واحد و انتقال ذره مورد بررسی با توجه به موقعیت سلول واحد در شبکه و سپس ترابرد ذره در آن استفاده شده است. قلب راکتور عموماً از کنار هم قرار گرفتن مجتمع‌های سوخت تشکیل می‌شود، هر مجتمع نیز از چیدمان منظم میله‌های سوخت،

کنترل و ... ایجاد می‌شود. بنابراین قلب یک راکتور از چیدمانی با الگوی مشخص از میله‌های مختلف تشکیل شده است. تعریف هندسه مربوط به تک تک این میله‌ها (که ممکن است به چند ده هزار میله برسد) با استفاده از سطوح درجه یک و دو کاری بسیار پیچیده و طاقت‌فرسا است. با توجه به این پیچیدگی امکان خطا در تعریف هندسه افزایش می‌یابد و اعمال تغییرات در آن را دشوار می‌کند. برای ساده کردن تعریف چنین هندسه‌هایی، می‌توان هندسه را به سلول‌های واحد تکرار شونده تقسیم کرد. از این رو در یک دید کلی می‌توان مجتمع‌های سوخت را یک سلول واحد در نظر گرفت، از آنجایی که ممکن است مجتمع‌های مختلفی درون قلب راکتور وجود داشته باشد، با توجه به ترکیب آنها می‌توان سلول‌های واحد مختلفی را در نظر گرفت. با استفاده از این سلول‌های واحد و چیدمان آنها قلب راکتور تشکیل می‌شود. در یک دید درونی‌تر هر یک از این مجتمع‌ها از کنار هم قرار گرفتن میله‌های مختلف (میله‌های سوخت، کنترل، کانال‌های راهنما و ...) تشکیل شده است، بنابراین در لایه^{۲۴} پایین‌تر دوباره شبکه‌ای از سلول‌های واحد داریم که با چیدمان مشخص کنار هم قرار گرفته‌اند.

این لایه‌ها ممکن است با توجه به سیستم مورد بررسی باز هم ادامه داشته باشند. بنابراین قلب راکتور را شبکه‌ای از مجتمع‌ها و هر مجتمع را شبکه‌ای از میله‌ها تشکیل داده است. گام نخست در تعریف این نوع هندسه تعریف سلول‌های واحد و سپس پر کردن سلول‌های مورد نظر (که خود ممکن است سلول واحد برای یک سلول دیگر باشد) از این سلول‌های واحد می‌باشد. با توجه به مطالب گفته شده برای تعریف هندسه‌های تکرار شونده باید به صورت زیر عمل نمود:

- تعریف سلول واحد از تجمیع یک یا چند سلول
- تعریف شبکه راست گوش و یا شش گوش
- تعریف شبکه با گام و الگوی چیدمانی مشخص

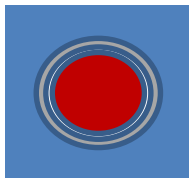
۶-۷-۱- تعریف هندسه شبکه‌ای

شاید ساده‌ترین راه برای تعریف هندسه‌های پیچیده همانند قلب راکتور تعریف تک تک سلول‌ها در هندسه با استفاده از سطوح محدود کننده آن باشد. پیاده سازی این روش در عمل بسیار سخت و از نظر حافظه پرهزینه می‌باشد. از این رو برای اجتناب از پیچیدگی‌های تعریف هندسه، اطلاعات از کاربر به صورت سلول‌های واحد و مشخصات شبکه و چیدمان آن دریافت و سپس سلول‌ها و سطوح مربوط به آنها درون کد تعریف می‌شود. برای مثال یک مکعب با ابعاد 4×4 را که با استفاده از یک مکعب 1×1 (سلول واحد) پر شده در نظر بگیرید. در این حالت نیاز به تعریف ۱۶ سلول می‌باشد که برای تعریف آنها ۱۵ سطح نیاز می‌باشد. حال فرض کنید ابعاد مکعب داخلی 0.1×0.1 شود تعداد سلول‌ها برابر ۱۶۰۰ و تعداد سطوح برابر ۱۲۳ می‌شود. اگر در هر یک از این مکعب‌ها سلول دیگری قرار داشته باشد و نیاز به تکثیر آنها نیز باشد پیچیدگی بیشتر می‌شود. بنابراین برای قلب یک راکتور که از تعداد زیادی مجتمع سوخت و میله‌های مختلف تشکیل شده است، استفاده از این روش بسیار پیچیده می‌شود.

راه حل ایده آل برای ترابرد ذرات در این هندسه‌ها استفاده از انتقال ذره به سلول واحد می‌باشد، که با استفاده از آن هر سلول واحد تنها یک بار تعریف می‌شود.

۶-۷-۲- تعریف سلول واحد از تجمیع یک یا چند سلول

برای تعریف سلول واحد ابتدا سلول‌های سازنده آن تعریف می‌شود. برای مثال اگر سلول واحد یک میله سوخت و خنک کننده اطراف آن باشد باید سلول‌های مربوط به سوخت، خلأ، غلاف و خنک کننده با استفاده از سطوح تعریف شوند (شکل ۳۵). موقعیت این سلول‌ها با در نظر گرفتن مبدأ مختصات در مرکز سلول واحد تعریف می‌شود (موقعیت محلی با مرکزیت مرکز سلول واحد)، سپس سلول‌های سازنده هر سلول واحد مشخص می‌شود.



شکل ۳۵: نمونه‌ای از سلول واحد در هندسه شبکه‌ای

در تعریف سلول واحد نکات زیر قابل ذکر است:

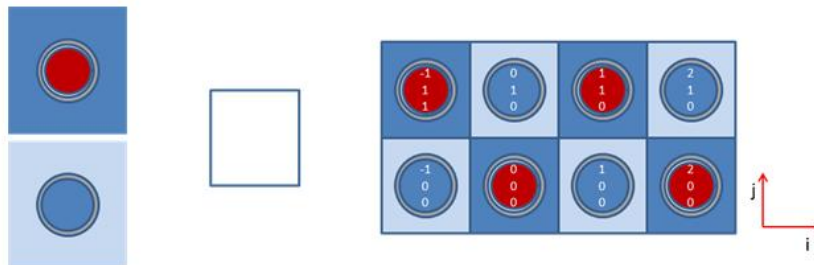
- هر سلول فقط می‌تواند به عنوان سلول سازنده یک سلول واحد استفاده شود ولی سطوح می‌تواند برای سلول‌های مختلف بکار گرفته شود.
- در ترابرد اصلی (در لایه پایین‌تر) سلول‌هایی که جزئی از یک سلول واحد باشند در جستجو برای سلول حاوی ذره و یا سلول‌های همسایه در نظر گرفته نمی‌شوند و جستجو در آنها تنها پس از وارد شدن ذره به سلول واحد (در لایه بالاتر) مربوط به آن انجام می‌شود.

- از آنجایی که سلول‌های واحد مربوط به یک شبکه باید دارای ابعاد یکسانی باشند، برای راحتی، یک سلول که به صورت قاب دور سلول واحد را در بر می‌گیرد تعریف شده و در تعریف شبکه بکار گرفته می‌شود. بنابراین می‌توان سلول‌های واحد را به صورت نامتناهی نیز تعریف کرد.
- برای ذخیره اطلاعات مربوط به تعریف سلول واحد، ساختار متغیر جدیدی در کد تعریف و بکار گرفته شده است. همچنین یک آرایه برای ذخیره لیست سلول‌های سازنده هر سلول واحد در نظر گرفته شده است.

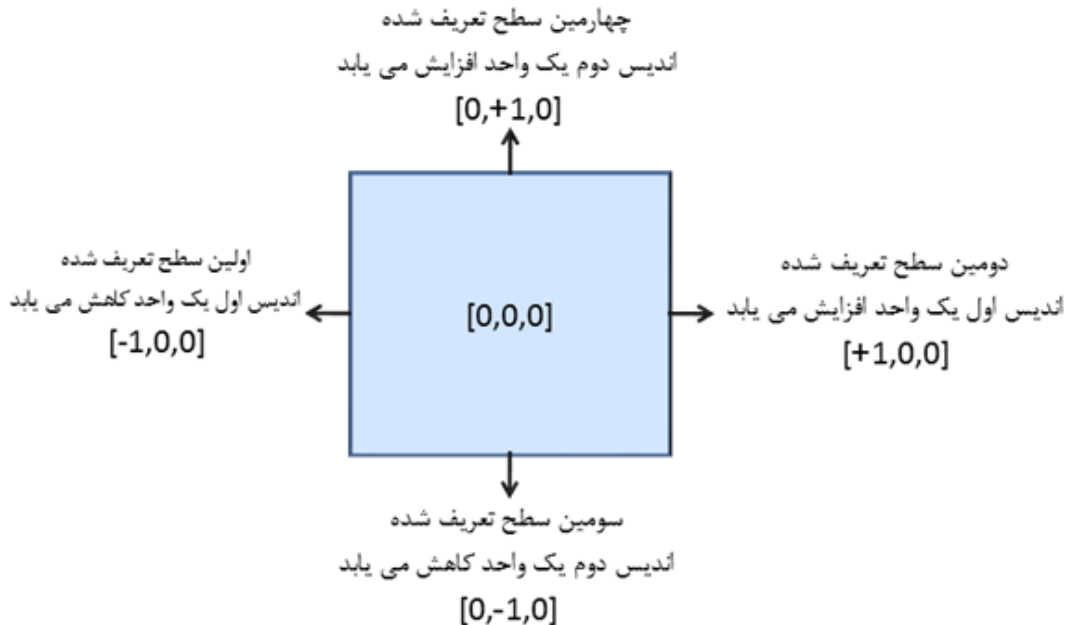
۶-۷-۳- تعریف شبکه با گام و الگوی چیدمانی مشخص

برای تعریف یک سلول به صورت شبکه‌ای از سلول‌های^{۲۵} واحد، ابتدا نوع شبکه که می‌تواند راست گوش و یا شش گوش باشد مشخص می‌شود. سپس سلولی (راست گوش و یا شش گوش) با اندیس $[0,0,0]$ به عنوان قاب سلول واحد مشخص

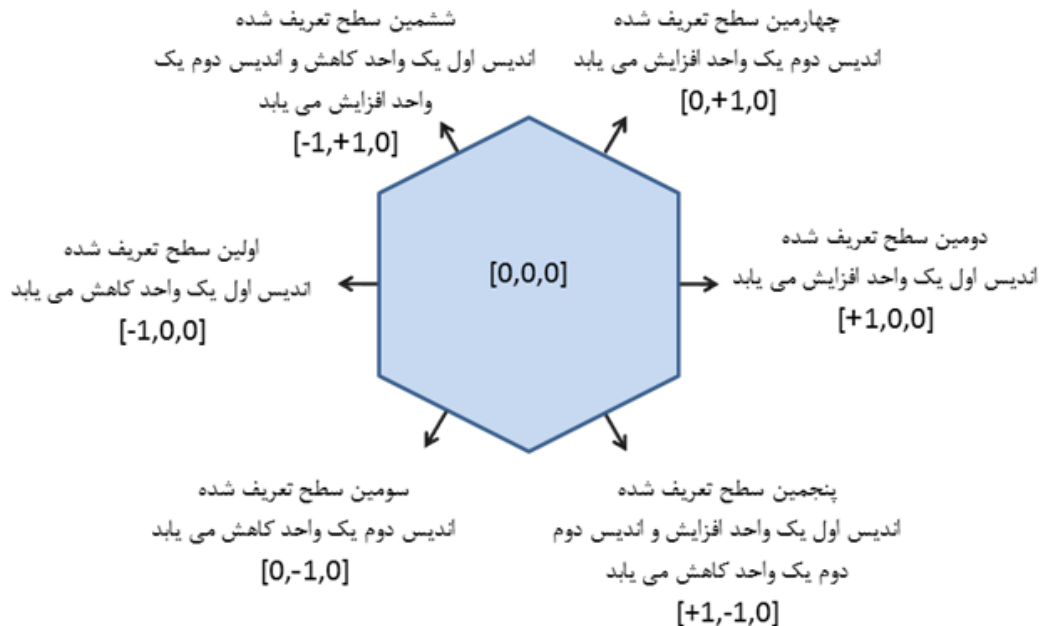
می شود. (این سلول می تواند برای شبکه های مختلف مورد استفاده قرار بگیرد و همچنین می تواند به صورت چرخیده شده در فضا نیز تعریف شود). موقعیت این سلول با مختصات محلی مربوط به یک لایه پایین تر بیان می شود و به عنوان مبدأ برای تعیین سلول واحد حاوی ذره استفاده می شود. برای مشخص کردن محدوده سلول های واحد، با توجه به قاب سلول واحد در نظر گرفته شده، گام شبکه و همچنین بردار یکه در هر بعد مشخص می شود. در آخر محدوده اندیس مربوط به سلول های واحد در هر بعد بیان شده و با توجه به آن چیدمان سلول های واحد مشخص می شود (شکل ۳۶).



شکل ۳۶: نمونه ای از هندسه شبکه ای راست گوش



شکل ۳۷: چگونگی تعیین اندیس سلول واحدها در شبکه راست گوش



شکل ۳۸: چگونگی تعیین اندیس سلول واحدها در شبکه شش گوش

نحوه‌ی اندیس‌گذاری سلول‌های واحد در ساختار شبکه‌ای راست‌گوش و شش‌گوش در شکل‌های ۳۷ و ۳۸ بیان شده است. این شماره‌گذاری متناسب با تقدم و تاخر سطوح تعریف شده در قاب سلول واحد می‌باشد. اندیس‌گذاری بعد سوم در هر دو ساختار مشابه روند نشان داده شده در شکل ۳۷ می‌باشد. بنابراین در تعریف شبکه اطلاعات زیر مشخص می‌شود:

- تعریف سلول معرف قاب شبکه
- نوع شبکه
- قاب سلول واحد با اندیس $[0,0,0]$
- مشخص کردن چیدمان سلول‌های واحد

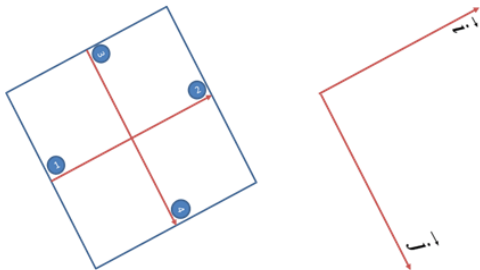
۶-۷-۴- تعریف شبکه‌های راست گوش و شش گوش

همانطور که پیشتر گفته شد هر سلول واحد با استفاده از یک سلول، که قاب سلول واحد را در شبکه مشخص می‌کند، محدود می‌شود. با توجه به نوع شبکه این قاب می‌تواند راست گوش و یا شش گوش باشد. از آنجایی که سلول‌های واحد ممکن است دارای چرخش فضایی باشند نمی‌توان بردارهای یکه ثابتی را برای مشخص کردن چیدمان شبکه تعریف کرد. از این رو از سطوح محدود کننده قاب شبکه برای تعریف بردارهای یکه جهت چیدمان استفاده می‌شود.

۶-۷-۴-۱- شبکه راست گوش

در شبکه راست گوش از قاب مکعبی برای محدود کردن سلول‌های واحد استفاده می‌شود. همانطور که در شکل ۳۹ مشاهده می‌شود، این قاب باید حداقل از دو و حداکثر از شش سطح تعریف شده باشد و در تعریف آن باید سطوح موازی دو به دو پشت سر هم آورده شود. با استفاده از معادله سطح اول و دوم، برداری که بر دو سطح عمود بوده و سطح اول را به سطح

دوم متصل می کند مشخص می شود. با استفاده از این بردار گام شبکه و بردار یکه در بعد اول مشخص می شود، برای بعدهای دیگر نیز به ترتیب سطح سوم و چهارم (در صورت وجود) و سطح پنجم و ششم (در صورت وجود) مورد استفاده قرار می گیرند. موازی بودن سطوح پشت سر هم و همچنین عمود بودن بردارهای یکه به صورت داخلی توسط کد بررسی می شود.



شکل ۳۹: نمونه‌ای از بردارهای واحد در هندسه شبکه‌ای راست گوش

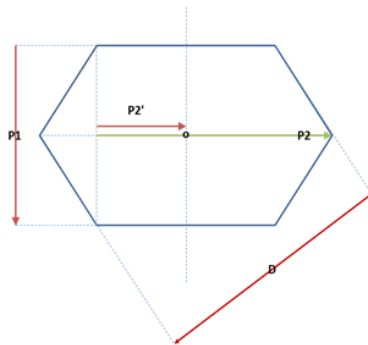
۶-۷-۴-۲- شبکه شش گوش

در شبکه شش گوش از یک قاب شش گوش منشوری برای محدود کردن سلول های واحد استفاده می شود. همانطور که در شکل ۴۰ مشاهده می شود، این قاب باید حداقل از شش و حداکثر از هشت سطح تعریف شده باشد و در تعریف آن باید سطوح موازی دو به دو پشت سر هم آورده شود. با استفاده از معادله سطح اول و دوم، برداری که گام شبکه و بردار یکه در بعد اول را مشخص می کند محاسبه می شود (P1). به همین صورت برای بعد سوم نیز از سطح هفتم و هشتم استفاده می شود. برای بعد دوم باید کمی محاسبات انجام شود، در این بعد گام شبکه با دو کمیت (P2, P2') مشخص می شود.

$$P_2 = \frac{D}{\sqrt{1-M^2}} - \frac{M \times P_1}{2\sqrt{1-M^2}}$$

(۴۰-۶)

$$P_2' = P_2 - \frac{M \times P_1}{2\sqrt{1-M^2}}$$



شکل ۴۰: نمونه‌ای از بردارهای واحد در هندسه شبکه‌ای شش گوش

پارامترهای زیر برای این روابط مورد تعریف می‌باشند:

P1: اندازه بردار عمودی بین صفحه اول و دوم (گام شبکه در بعد اول)

P2 و P2': مشخص کننده‌ی گام شبکه در بعد دوم

D: اندازه بردار عمودی بین صفحه سوم و چهارم

M: کسینوس زاویه بین بردار D و P1

موازی بودن سطوح پشت سر هم و همچنین متقارن بودن نرمال‌های سوم و پنجم و همچنین در یک صفحه بودن و عمود بودن آنها به بردار یکه بعد سوم به صورت داخلی توسط کد بررسی می‌شود.

۶-۷-۵- پیداکردن سلول حاوی ذره در هندسه شبکه‌ای

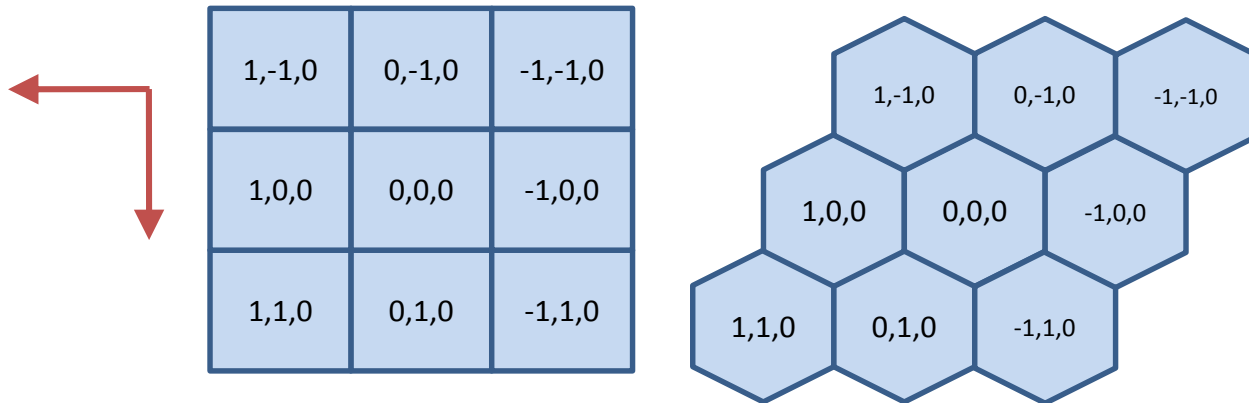
برای شروع ترابرد ابتدا باید سلول حاوی ذره مشخص شود. این عمل با بررسی حضور ذره در تک تک سلول‌های تعریف شده برای هندسه (به جز سلول‌هایی که برای تعریف سلول واحد بکار گرفته شده‌اند) انجام می‌شود. در صورتی که سلول

حاوی ذره، سلول شبکه‌ای باشد باید عملیات جستجوی سلول با توجه به الگوریتم سلول‌های شبکه‌ای که در ادامه توضیح داده می‌شود ادامه یابد، و در غیر این صورت ترابرد از سلول یافته شده آغاز می‌شود.

در صورتی که ذره در یک سلول شبکه‌ای قرار داشته باشد، باید اندیس مربوط به سلول واحد حاوی آن مشخص شود. این عملیات با استفاده از بردارهای یکه و همچنین گام شبکه که در بخش قبل روند محاسبه آن توضیح داده شد انجام می‌شود.

در اینجا باید به این نکته تاکید شود که یک سلول شبکه‌ای باید کاملاً توسط شبکه‌های سلول واحد پر شده باشد در غیر این صورت روند سلول‌یابی دچار مشکل می‌شود. بعبارتی دیگر محدوده‌ی سلول شبکه‌ای باید به گونه‌ای انتخاب شود تا فضایی در داخل سلول بدون سلول واحد نباشد.

الگوریتم محاسبات برای یافتن اندیس سلول واحد برای شبکه راست گوش و شش گوش متفاوت است. در شکل ۴۱ نمونه‌ای از این اندیس‌گذاری نشان داده شده است.



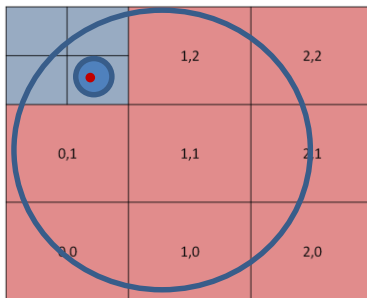
شکل ۴۱: نمونه‌ای از اندیس‌گذاری سلول‌های واحد در هندسه شبکه‌ای

پس از یافتن سلول واحد حاوی ذره، موقعیت ذره از موقعیت عمومی به موقعیت محلی با مرکزیت مرکز سلول واحد تغییر می‌یابد. سپس سلول‌های سازنده سلول واحد برای حضور ذره مورد بررسی قرار می‌گیرند. در این عملیات از موقعیت محلی

ذره استفاده می‌شود. در صورت شبکه‌ای بودن سلول یافته شده، عملیات جستجو مشابه بالا تا پیدا کردن سلول نهایی حاوی ذره ادامه می‌یابد.

از آنجایی که برای ثبت وقایع مربوط به ذره و همچنین ترابرد آن موقعیت عمومی ذره باید مشخص باشد. متغیرهای مربوط به نگهداری موقعیت ذره به صورت آرایه‌ای تعریف می‌شود و با ورود ذره به داخل یک سلول شبکه‌ای، لایه بعدی از این آرایه برای ذخیره موقعیت محلی ذره در شبکه استفاده می‌شود. بنابراین در هر لایه سه متغیر برای نگهداری مکان محلی ذره در آن سلول شبکه‌ای بکار گرفته می‌شود (متغیرهای دیگری نیز برای نگهداری سلول حاوی ذره و اندیس سلول‌های واحد در آن لایه نیاز می‌باشد) و در لایه صفر، موقعیت عمومی ذره نگهداری می‌شود.

برای مثال، هندسه نمایش داده شده در شکل ۴۲ را در نظر بگیرید. در این هندسه یک استوانه با شبکه ای $۳*۳$ از سلول‌های واحد به رنگ قرمز پر شده است. سلول واحد $[۰,۲]$ خود با شبکه‌ای $۲*۲$ از سلول‌های واحد به رنگ آبی پر شده است، ذره مورد بررسی در یک استوانه در سلول واحد $[۱,۰]$ از این شبکه قرار دارد.



شکل ۴۲: نمونه‌ای از مکان ذره در سلول شبکه‌ای

برای انجام عملیات یافتن این ذره مراحل زیر انجام می‌شود:

۱. با توجه به موقعیت ذره، این ذره در استوانه بزرگ قرار دارد. موقعیت و سلول حاوی آن (C1) در لایه صفر ذخیره می‌شود. از آنجایی که این سلول یک سلول شبکه‌ای است روند یافتن ذره به صورت زیر دنبال می‌شود.
۲. با توجه به موقعیت سلول واحد [0,0] و همچنین گام شبکه اول در هر بعد، ذره در سلول واحد [0,2] قرار دارد. بنابراین موقعیت محلی ذره با توجه به مرکز سلول واحد [0,2] شبکه اول محاسبه و در لایه اول ذخیره می‌شود. از آنجایی که این سلول واحد خود یک سلول شبکه‌ای است روند یافتن ذره به صورت زیر دنبال می‌شود.
۳. با توجه به موقعیت سلول واحد [0,0] و همچنین گام شبکه دوم در هر بعد، ذره در سلول واحد [1,0] شبکه دوم قرار دارد. بنابراین موقعیت محلی ذره با توجه به مرکز سلول واحد [1,0] شبکه دوم محاسبه و در لایه دوم ذخیره می‌شود.
۴. تک تک سلول‌های سازنده سلول واحد [1,0] شبکه دوم برای حضور ذره بررسی می‌شود و محل ذره استوانه C2 تشخیص داده می‌شود.

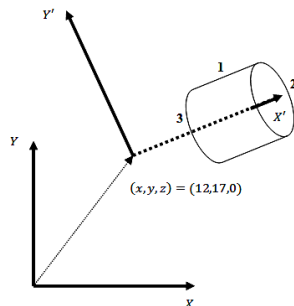
مقادیر ذخیره شده در هر لایه از آرایه فضای فاز ذره در جدول شماره ۶ نشان داده شده است، این آرایه به همراه بالاترین لایه‌ای که ذره در آن قرار دارد و اطلاعات دیگر همانند انرژی و جهت حرکت ذره برای ترابرد مورد استفاده قرار می‌گیرد.

جدول شماره ۶: نحوه ذخیره اطلاعات مربوط به لایه‌های مختلف در هندسه شبکه‌ای

لايه	موقعیت محلی ذره			شبکه	اندیس محلی			سلول
	X_0	Y_0	Z_0					
0	X_0	Y_0	Z_0	0	-	-	-	C_1
1	X_1	Y_1	Z_1	1	0	2	0	0
2	X_2	Y_2	Z_2	2	1	0	0	C_2

۶-۸- تبدیل دستگاه‌های مختصات

گاهی اوقات با مسائلی روبرو می‌شویم که تعریف نمودن سطوح هندسه‌ی مسئله در دستگاه مختصات مرجع کار پر زحمتی است، در حالی که اگر دستگاه مختصات را تغییر دهیم در آن دستگاه تعریف سطوح هندسه‌ی سیستم کار ساده‌تری می‌شود. مانند تعریف هندسه‌ی نشان داده شده در شکل (۴۳).



شکل ۴۳: نمایشی از توصیف هندسه سیستم در دو دستگاه مختصات مختلف

در این کد قابلیت تعریف تمام و یا بخشی از هندسه‌ی سیستم در دستگاه مختصاتی غیر از دستگاه مختصات مرجع (اصلی)^{۲۶} فراهم شده است. با این کار کاربر می‌تواند هر چه ساده‌تر هندسه‌ی سیستم را تعریف نماید، در واقع با افزوده شدن این قابلیت می‌توان سطوح پایه و احجام هندسی را در یک دستگاه مختصات محلی^{۲۷} (کمکی) که در آن توصیف سطوح ساده‌تر باشد، تعریف نموده و سپس با استفاده از تبدیلات دستگاه مختصات، معادله‌ی سطوح را در دستگاه مرجع بدست آورد و ترابرد نوترون را در آن دستگاه انجام داد.

از آنجائی که ترابرد نوترون در یک دستگاه مرجع که تمامی سطوح در آن تعریف شده‌اند انجام می‌پذیرد، لذا باید توصیف تمامی سطوح را در دستگاه مختصات مرجع بدست آورده و از آن در تعریف سلول‌ها استفاده شود.

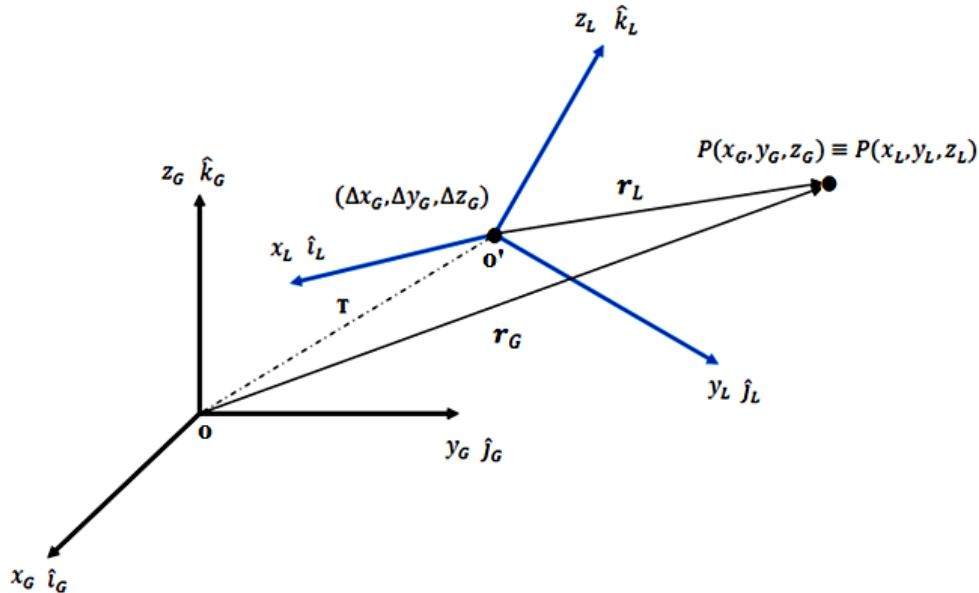
Global Coordinate ۲۶

Local Coordinate ۲۷

۶-۸-۱- تبدیل دستگاه مختصات دکارتی

از دید ناظرهای واقع در دستگاه‌های مختصات مختلف، هندسه‌ی یک سیستم یکسان با روابط مختلفی توصیف می‌گردد، که این توصیفات با روابط تبدیل مختصات به هم مرتبط می‌باشند. تبدیلات مختلفی برای تبدیل مختصات از یک دستگاه به دستگاه دیگر وجود دارد. در اینجا تنها به تبدیل خطی میان دستگاه‌ها پرداخته می‌شود، که در آن مختصات یک نقطه در فضا در دو دستگاه مختلف توسط یک دستگاه معادلات خطی به هم مرتبط می‌شوند. یکی از این دستگاه‌ها به عنوان دستگاه مرجع یا اصلی و دیگری به عنوان دستگاه محلی یا کمکی در نظر گرفته می‌شود.

همانطور که ذکر شد، رابطه‌ی بین مؤلفه‌های یک بردار (مختصات یک نقطه) در دو دستگاه مختلف، معادلات تبدیل نامیده می‌شوند. برای بدست آوردن این رابطه‌ی تبدیل بین دو دستگاه مختصات مختلف دکارتی، شکل ۴۴ را در نظر می‌گیریم.



شکل ۴۴: دوران و انتقال دستگاه مختصات دکارتی نشان داده شده توسط دو دستگاه مختصات اصلی و محلی

در شکل ۴۴ دو دستگاه مختصات راست گوشه متعامد دکارتی نشان داده شده است. یکی با مبدأ O و بردارهای پایه \hat{k}_G ، \hat{j}_G و دیگری با مبدأ O' و بردارهای پایه \hat{k}_L ، \hat{j}_L ، \hat{i}_L . دستگاه اول را مرجع و دستگاه دوم را محلی می‌نامیم. دستگاه محلی با دوران^{۲۸} بردارهای پایه دستگاه مرجع و انتقال^{۲۹} آنها (یا ابتدا انتقال بعد دوران) بدست آمده است. نمایش ماتریسی رابطه‌ی بین مؤلفه‌های مختصات نقطه‌ی P ، در دستگاه مرجع (x_G, y_G, z_G) و در دستگاه محلی (x_L, y_L, z_L) به صورت زیر می‌باشد

$$\mathbf{r}_G = \mathbf{R} \mathbf{r}_L + \mathbf{T} \quad (۴۱-۶)$$

در این رابطه داریم:

Rotation ۲۸

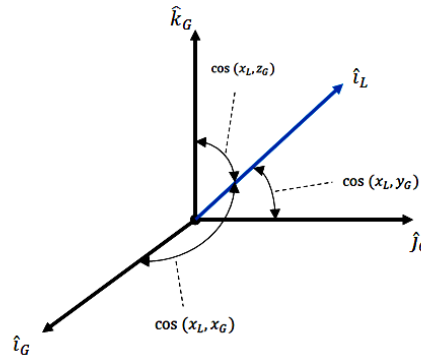
Transfer ۲۹

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \hat{i}_L \cdot \hat{i}_G & \hat{j}_L \cdot \hat{i}_G & \hat{k}_L \cdot \hat{i}_G \\ \hat{i}_L \cdot \hat{j}_G & \hat{j}_L \cdot \hat{j}_G & \hat{k}_L \cdot \hat{j}_G \\ \hat{i}_L \cdot \hat{k}_G & \hat{j}_L \cdot \hat{k}_G & \hat{k}_L \cdot \hat{k}_G \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(x_L, x_G) & \cos(y_L, x_G) & \cos(z_L, x_G) \\ \cos(x_L, y_G) & \cos(y_L, y_G) & \cos(z_L, y_G) \\ \cos(x_L, z_G) & \cos(y_L, z_G) & \cos(z_L, z_G) \end{bmatrix} \quad \mathbf{T} = \begin{bmatrix} \Delta x_G \\ \Delta y_G \\ \Delta z_G \end{bmatrix}$$

رابطه‌ی فوق یک حالت عمومی از تبدیل خطی است که شامل ماتریس \mathbf{R} و بردار \mathbf{T} می‌باشد. به عبارت دیگر این تبدیل شامل دو قسمت است، شامل انتقال مبدأ دستگاه مختصات که با بردار \mathbf{T} بیان شده و شامل دوران دستگاه مختصات که با ماتریس \mathbf{R} بیان شده است، این ماتریس شامل کسینوس‌های هادی (کسینوس‌های زوایای بین محورهای دو دستگاه) است. تعدادی از این کسینوس‌های هادی در شکل ۴۵ نشان داده شده است.

همانطور که مشاهده شده، رابطه‌ی (۶-۴۱) بین مؤلفه‌های مختصات یک نقطه‌ی دلخواه در دو دستگاه مختلف وجود دارد. اما معمولاً تبدیلات ترکیبی (انتقال - دوران) همانند مورد ذکر شده، در قالب یک ماتریس تبدیل به صورت رابطه‌ی (۶-۴۲) بیان می‌شوند.

$$\begin{bmatrix} x_L \\ y_L \\ z_L \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{i}_L \cdot \hat{i}_G & \hat{j}_L \cdot \hat{i}_G & \hat{k}_L \cdot \hat{i}_G & \Delta x_G \\ \hat{i}_L \cdot \hat{j}_G & \hat{j}_L \cdot \hat{j}_G & \hat{k}_L \cdot \hat{j}_G & \Delta y_G \\ \hat{i}_L \cdot \hat{k}_G & \hat{j}_L \cdot \hat{k}_G & \hat{k}_L \cdot \hat{k}_G & \Delta z_G \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} x_G \\ y_G \\ z_G \\ 1 \end{bmatrix} = TRF \begin{bmatrix} x_G \\ y_G \\ z_G \\ 1 \end{bmatrix} \quad (۴۲-۶)$$



شکل ۴۵: کسینوس هادی بین یکی از مؤلفه‌های دستگاه مختصات محلی و سه مؤلفه‌ی دستگاه مختصات مرجع

۶-۸-۲- نمایش ماتریسی معادلات سطوح

معادلات سطوح درجه یک و درجه دوم مورد استفاده در کد می‌توانند در قالب یک معادله‌ی درجه دوم عمومی به صورت رابطه‌ی زیر بیان شوند.

$$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gx + Hy + Jz + k = 0$$

معادله‌ی فوق در قالب ماتریسی به صورت زیر قابل بیان می‌باشد.

$$[x \ y \ z \ 1]SM \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \quad (۴۳-۶)$$

در رابطه‌ی فوق ماتریس SM ، ماتریس ضرایب معادله‌ی سطح نامیده شده و با رابطه‌ی زیر نمایش داده می‌شود.

$$SM = \begin{bmatrix} A & D/2 & F/2 & G/2 \\ D/2 & B & E/2 & H/2 \\ F/2 & E/2 & C & J/2 \\ G/2 & H/2 & J/2 & K \end{bmatrix} \quad (۴۴-۶)$$

باید به این نکته توجه داشت که سعی شود از این نوع سطح برای مواردی استفاده شود که محورها و یا بردارهای عمود بر سطوح، موازی محورهای اصلی دستگاه مختصات نباشند. البته یکی از کاربردهای امکان تعریف سطوح در دستگاه‌های محلی این است که کاربر بتواند سطوح مورد نظر خود را در دستگاهی تعریف نماید که محور و یا در مورد صفحات، بردار عمود بر سطوح موازی یکی از محورهای اصلی در دستگاه محلی باشد و به جز در موارد ضرورت از تعریف سطح GQ استفاده نشود. بدین ترتیب ماتریس SM با توجه به نوع سطوح و ضرایب آن‌ها تشکیل می‌شود.

۶-۸-۳- معادله‌ی سطوح در دستگاه مختصات مرجع

با استفاده از روابطی که در این بخش بیان می‌شود، می‌توان شکل ماتریسی (ماتریس ضرایب سطح) سطح مورد نظر را در دستگاه مختصات مرجع تشکیل داده و با استفاده از آن، نوع و پارامترهای سطح را در دستگاه مرجع یافت و بر اساس آن ترابرد نوترون را پیگیری نمود. با تعریف شدن یک سطح در دستگاه مختصات محلی، ماتریس ضرایب آن در دستگاه محلی یعنی SM_L مشخص می‌شود. بنابراین نمایش ماتریسی یک سطح در دستگاه محلی با رابطه‌ی (۶-۴۵) بیان می‌شود.

$$[x_L \ y_L \ z_L \ 1] SM_L \begin{bmatrix} x_L \\ y_L \\ z_L \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \quad (۶-۴۵)$$

و همچنین نمایش ماتریسی یک سطح در دستگاه مرجع با رابطه‌ی (۶-۴۶) بیان می‌شود.

$$[x_G \ y_G \ z_G \ 1] \mathbf{SM}_G \begin{bmatrix} x_G \\ y_G \\ z_G \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \quad (46-6)$$

در روابط فوق \mathbf{SM}_L و \mathbf{SM}_G به ترتیب برابر با ماتریس ضرایب سطح در دستگاه مختصات محلی و مرجع می‌باشند.

از طرفی طبق رابطه‌ی (42-6) داریم:

$$\begin{bmatrix} x_L \\ y_L \\ z_L \\ 1 \end{bmatrix} = TRF \begin{bmatrix} x_G \\ y_G \\ z_G \\ 1 \end{bmatrix}$$

با ترانزفورد گرفتن از رابطه‌ی فوق داریم:

$$[x_L \ y_L \ z_L \ 1] = [x_G \ y_G \ z_G \ 1] TRF^T \quad (47-6)$$

با جایگذاری روابط (42-6) و (47-6) در رابطه‌ی (45-6) داریم:

$$[x_G \ y_G \ z_G \ 1] TRF^T \mathbf{SM}_L TRF \begin{bmatrix} x_G \\ y_G \\ z_G \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \quad (48-6)$$

از مقایسه رابطه‌ی فوق با رابطه‌ی (۴۶-۶) مشخص می‌گردد که ماتریس ضرایب معادله‌ی سطح مورد نظر در دستگاه مرجع با رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$\mathbf{SM}_G = TRF^T \mathbf{SM}_L TRF \quad (49-6)$$

با توجه به منحصر به فرد بودن ماتریس ضرایب یک سطح خاص، ساده‌ترین (کم پارامترترین) نوع سطح و پارامترهای آن بدست می‌آید.

۷- سطح مقطع های گروهی و تعریف ماده

سطح مقطع های گروهی که در کدهای یقینی مورد استفاده قرار می گیرند، به شیوه های مختلفی قابل تعریف هستند. این امر ناشی از تعاریف مختلف سطح مقطع جذب می باشد. به عنوان مثال ممکن است کتابخانه ی گروهی مورد استفاده در کدهای یقینی شامل داده های زیر باشد:

- σ_T^g : سطح مقطع میکروسکوپی کل برای گروه g
- σ_A^g : سطح مقطع میکروسکوپی جذب برای گروه g
- $\nu\sigma_F^g$: سطح مقطع میکروسکوپی شکافت برای گروه g ضرب شده در تعداد نوترون های حاصل از شکافت برای گروه g
- $\sigma_S^{g \rightarrow g'}$: سطح مقطع میکروسکوپی پراکندگی از گروه g به گروه g' (این سطح مقطع با تعداد ذرات خروجی وزن شده می باشد)

سطح مقطع‌های کل، شکافت و پراکندگی گروهی به صورت زیر تعریف شده‌اند:

$$\sigma_T^g = \sigma_{n \rightarrow n}^g + \sigma_{n \rightarrow n'}^g + \sigma_{n \rightarrow 2n}^g + \sigma_{n \rightarrow 3n}^g + \sigma_{n \rightarrow \gamma}^g + \sigma_{n \rightarrow f}^g + \sigma_{n \rightarrow n'f}^g + \sigma_{n \rightarrow 2nf}^g \quad (1-7)$$

$$\sigma_F^g = \sigma_{n \rightarrow f}^g + \sigma_{n \rightarrow n'f}^g + \sigma_{n \rightarrow 2nf}^g \quad (2-7)$$

$$\sigma_S^{g \rightarrow g'} = \sigma_{n \rightarrow n}^g + \sigma_{n \rightarrow n'}^g + 2\sigma_{n \rightarrow 2n}^g + 3\sigma_{n \rightarrow 3n}^g + \sigma_{n \rightarrow n'f}^g + 2\sigma_{n \rightarrow 2nf}^g \quad (3-7)$$

این داده‌ها با استفاده از سطح مقطع‌های زیر تعریف می‌شوند.

- $\sigma_{n \rightarrow n}^g$: سطح مقطع میکروسکوپی پراکندگی کشسان برای گروه g
- $\sigma_{n \rightarrow n'}^g$: سطح مقطع میکروسکوپی پراکندگی ناکشسان ($n \rightarrow n'$) برای گروه g
- $\sigma_{n \rightarrow 2n}^g$: سطح مقطع میکروسکوپی پراکندگی ($n \rightarrow 2n$) برای گروه g

- $\sigma_{n \rightarrow 3n}^g$: سطح مقطع میکروسکوپی پراکندگی $(n \rightarrow 3n)$ برای گروه g
- $\sigma_{n \rightarrow \gamma}^g$: سطح مقطع میکروسکوپی جذب پرتوزا برای گروه g
- $\sigma_{n \rightarrow f}^g$: سطح مقطع میکروسکوپی شکافت برای گروه g
- $\sigma_{n \rightarrow n'f}^g$: سطح مقطع میکروسکوپی واکنش $(n \rightarrow n'f)$ برای گروه g
- $\sigma_{n \rightarrow 2nf}^g$: سطح مقطع میکروسکوپی واکنش $(n \rightarrow 2nf)$ برای گروه g

همانطور که مشاهده می شود سطح مقطع پراکندگی علاوه بر پراکندگی کشسان شامل سطح مقطع های دیگری نیز می باشد.

این کار برای ترکیب نمودن داده های توزیع زاویه ای این واکنش ها به یک سطح مقطع انجام می شود.

سطح مقطع جذب به روش های مختلفی بیان می شود که در اینجا به سه روش مرسوم اشاره می شود.

$$\sigma_A^g = \sigma_{n \rightarrow \gamma}^g \quad (۴-۷)$$

$$\sigma_A^g = \sigma_{n \rightarrow \gamma}^g - \sigma_{n \rightarrow 2n}^g - 2\sigma_{n \rightarrow 3n}^g - \sigma_{n \rightarrow n'f}^g - 2\sigma_{n \rightarrow 2nf}^g \quad (5-7)$$

$$\begin{aligned} \sigma_A^g &= \sigma_{n \rightarrow \gamma}^g - \sigma_{n \rightarrow 2n}^g - 2\sigma_{n \rightarrow 3n}^g - \sigma_{n \rightarrow n'f}^g - 2\sigma_{n \rightarrow 2nf}^g + \sigma_F^g \\ &= \sigma_{n \rightarrow \gamma}^g - \sigma_{n \rightarrow 2n}^g - 2\sigma_{n \rightarrow 3n}^g - \sigma_{n \rightarrow f}^g - \sigma_{n \rightarrow 2nf}^g \end{aligned} \quad (6-7)$$

در معادله‌ی اول سطح مقطع جذب همان جذب پرتوزا در نظر گرفته شده است. اما در معادله‌ی دوم سطح مقطع جذب به گونه‌ای تعریف می‌شود که رابطه زیر برقرار باشد.

$$\sigma_T^g = \sigma_S^{g-total} + \sigma_A^g + \sigma_F^g \quad (7-7)$$

$$\sigma_S^{g-total} = \sum_{g'}^G \sigma_S^{g \rightarrow g'}$$

در اکثر کدهای یقینی از کمیت $v\sigma_F^g$ استفاده می‌شود. بنابراین، در این موارد، سطح مقطع شکافت به صورت مجزا در دسترس نمی‌باشد، لذا در این موارد می‌توان عبارت $(\sigma_A^g + \sigma_F^g)$ را به عنوان سطح مقطع جذب (σ_A^g) در نظر گرفت (رابطه‌ی (۶-۷)) و از طرفی برای برقرار شدن رابطه‌ی (۷-۷) سطح مقطع شکافت را در این رابطه برابر صفر قرار داد.

پراکندگی نوترون بر حسب سطح مقطع دیفرانسیلی $(\sigma(E \rightarrow E', \mu_c))$ بیان می‌شود. قسمت زاویه‌ای سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی در کدهای ترابرد یقینی عموماً بر حسب ممان‌های لژاندر تا هر مرتبه دلخواهی (L) به صورت رابطه‌ی (۸-۷) بسط داده می‌شود.

$$\begin{aligned}\sigma_s(E \rightarrow E', \mu_c) &= \sigma_{s0}(E)P_1(E \rightarrow E')P_2(\mu_c|E \rightarrow E') \\ &= \sigma_{s0}(E) \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{2} a_{sl}(E \rightarrow E')P_l(\mu_c)\end{aligned}$$

$$= \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{2} \sigma_{sl}(E \rightarrow E') P_l(\mu_c) \quad (\text{۸-۷})$$

در این رابطه داریم:

$\sigma_{s0}(E)$: سطح مقطع پراکندگی.

μ_c : کسینوس زاویه پراکندگی در دستگاه مرکز جرم.

$P_1(E \rightarrow E')$: تابع توزیع احتمال پراکندگی از انرژی E به E' .

$P_2(\mu_c | E \rightarrow E')$: تابع توزیع احتمال پراکندگی نوترون با کسینوس پراکندگی μ_c به شرطی که نوترون بعد از پراکندگی

دارای انرژی E' شده باشد.

P_l : چند جمله‌ای لژاندر مرتبه‌ی l .

a_{sl} : ضرایب بسط لژاندر.

رابطه‌ی (۹-۷) برای محاسبه‌ی مقدار σ_{sl} برقرار است.

$$\sigma_{sl}(E \rightarrow E') = \sigma_{s0}(E) a_{sl}(E \rightarrow E') = \int_{-1}^1 d\mu_c \sigma_s(E \rightarrow E', \mu_c) P_l(\mu_c) \quad (9-7)$$

در استفاده از ضرایب بسط لژاندر در بیان ناهمسانگردی پراکندگی در روش مونت کارلو (بدست آوردن تابع توزیع زاویه‌ای بعد از پراکندگی) باید با دقت عمل نمود. در واقع در برخی از مواقع امکان وجود مقادیر منفی برای سطح مقطع‌ها در بسط با مرتبه‌ی محدود L وجود دارد، در نتیجه تابع توزیع زاویه‌ای در بخشی از بازه‌ی [-1,1] منفی و نمونه‌برداری مستقیم از چنین تابع توزیعی با مشکل روبرو می‌گردد و باید تبدیلات مناسبی به روی آن صورت گیرد.

در تقریب گروهی معادله ترابرد، سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی گروهی $(\sigma_s^{g \rightarrow g'}(\mu_c))$ به صورت رابطه (۷-۱۰) قابل تفکیک می باشد.

$$\begin{aligned} \sigma_s^{g \rightarrow g'}(\mu_c) &= \sigma_{s0}^g P_1^{g \rightarrow g'} P_2^{g \rightarrow g'}(\mu_c) = \sigma_{s0}^g \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} a_{sl}^{g \rightarrow g'} P_l(\mu_c) \\ &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sigma_{sl}^{g \rightarrow g'} P_l(\mu_c) \end{aligned} \quad (۷-۱۰)$$

$\sigma_s^{g \rightarrow g'}(\mu_c)$: سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی با کسینوس زاویه‌ی پراکندگی μ_c از گروه g به گروه g'

σ_{s0}^g : سطح مقطع پراکندگی برای گروه g .

$P_1^{g \rightarrow g'}$: احتمال پراکندگی از گروه g به گروه g' که با رابطه‌ی (۷-۱۱) تعریف می شود.

$$P_1^{g \rightarrow g'} = \sigma_{S,0}^{g \rightarrow g'} / \sum_{k'=1}^G \sigma_{S,0}^{g \rightarrow k'} \quad (11-7)$$

احتمال شرطی پراکندگی با کسینوس زاویه پراکندگی μ_c (با شرط پراکندگی از گروه g به گروه g') که به صورت رابطه (12-7) بیان می شود.

$$P_2^{g \rightarrow g'}(\mu_c) = \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{2} a_l^{g \rightarrow g'} P_l(\mu_c) \quad (12-7)$$

ضرایب بسط لژاندر که عموماً پراکندگی غیرهمسانگرد به وسیله این ضرایب بیان می شود.

$$a_l^{g \rightarrow g'} = \sigma_{S,l}^{g \rightarrow g'} / \sigma_{S,0}^{g \rightarrow g'} \quad (13-7)$$

در کد MCTRAN سطح مقاطع مواد به صورت زیر تعریف و از کاربر دریافت می شوند.

۱. سطح مقطع کل گروهی: (σ_{t_g})

۲. مقادیر طیف شکافت گروهی: (χ_g)

۳. سطح مقطع شکافت گروهی: (σ_{f_g})

۴. تعداد متوسط نوترون‌های حاصل از شکافت $(\bar{\nu}_g)$

۵. سطح مقاطع پراکندگی گروه به گروه برای ممان‌های مختلف l : $(\sigma_{s_g \rightarrow g'}^l)$

سطح مقاطع میکروسکوپی در کد بر حسب بارن و چگالی اتمی بر حسب $(\frac{atoms}{barns.cm^2})$ دریافت می‌شود. البته می‌توان به

جای سطح مقاطع میکروسکوپی از سطح مقاطع ماکروسکوپی استفاده نمود و مقدار چگالی اتمی را در هنگام تعریف

سلول برابر یک در نظر گرفت.

با استفاده از کتابخانه سطح مقاطع میکروسکوپی و با توجه به چگالی اتمی مواد، سطح مقاطع ماکروسکوپی برای هر یک از مواد محاسبه و درون آرایه سطح مقاطع ماکروسکوپی ذخیره می‌شود.

۸- آشنایی با مفاهیم آماری

۸-۱- برآورد کننده‌ها^{۳۰}

برآورد کننده، تابعی از نمونه‌های تصادفی یک متغیر تصادفی است که به صورت آماری مقدار متوسط یک کمیت نامعلوم وابسته به متغیر تصادفی را تخمین می‌زند. به عنوان مثال اگر X یک متغیر تصادفی با توزیع خاص باشد، آنگاه تابع

$X(x_1, x_2, \dots, x_n)$ را می توان به صورتی تعریف کرد که یک برآورد کننده از مقدار متوسط آن باشد $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ نمونه های تصادفی مستقل بدست آمده از تابع توزیع X می باشند).

یک برآورد کننده خوب باید بی طرفانه ^{۳۱}، سازگار ^{۳۲} و کارآمد ^{۳۳} باشد.

- برآورد کننده ای بی طرفانه است که تغییری در مقدار صحیح متوسط کمیت مورد نظر ایجاد نکند.

۳۱ Unbiased

۳۲ Consistent

۳۳ Efficient

فرض کنیم X_1, X_2, \dots, X_n اعداد تصادفی باشند و $t = t(X_1, X_2, \dots, X_n)$ یک برآورد کننده آماری برای تخمین پارامتر Θ با استفاده از این اعداد تصادفی باشد، آنگاه اگر مقدار متوسط این برآورد کننده برای تخمین پارامتر Θ برابر با مقدار صحیح پارامتر Θ باشد، به این برآورد کننده آماری یک برآورد کننده بی طرفانه گفته می شود.

(به بیان ریاضی یعنی $E(t) = \Theta$)

- چنانچه مقدار یک برآورد کننده به ازای مقدار بزرگ N از منظر آماری به مقدار متوسط درست میل کند، این برآورد کننده سازگار نامیده می شود.
- یک برآورد کننده کارآمد، برآورد کننده ای است که در میان گروهی از برآورد کننده های بی طرفانه با تعداد نمونه های برابر، دارای واریانس کمتری باشد.

۸-۲- میانگین نمونه‌ای

اگر با انجام N آزمایش، مقادیر X_1, X_2, \dots, X_N را برای کمیت تصادفی X مشاهده کنیم، آنگاه میانگین حسابی (میانگین نمونه‌ای) این نمونه‌ها به صورت رابطه (۸-۱) بیان می‌شود. به ازای مقادیر بزرگ N متوسط نمونه‌ای، تقریب خوبی از مقدار متوسط جمعیتی μ می‌باشد.

$$E(X) = \bar{X} = \sum_{i=1}^N X_i / N \quad (8-1)$$

مقدار صحیح متوسط متغیر تصادفی X برابر μ فرض می‌شود. اگر از رابطه‌ی فوق متوسط‌گیری شود، نتیجه‌ی زیر حاصل می‌گردد.

$$\langle \bar{X} \rangle = \sum_{i=1}^N \langle X_i \rangle / N = \frac{N\mu}{N} = \mu$$

لذا با توجه به نتیجه فوق این تخمین برای مقدار متوسط X بی طرفانه است.

۸-۳- واریانس نمونه‌ای

واریانس نمونه‌ای کمیت X ، پخش شدگی مشاهده‌ها را از متوسط جمعیتی (متوسط درست) بیان می‌کند. اگر تخمینی از واریانس یک فرآیند تصادفی به صورت زیر در نظر گرفته شود، به بررسی بی طرفانه بودن این تخمین می‌پردازیم.

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{n} \quad (۲-۸)$$

مقدار صحیح و درست واریانس مقادیر تصادفی X از متوسطشان برابر σ^2 فرض می‌شود. با متوسط‌گیری از رابطه‌ی فوق، نتیجه‌ی زیر حاصل می‌گردد.

$$\begin{aligned}
 E(S^2) &= E\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2\right) = E\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n ((X_i - \mu) - (\bar{X} - \mu))^2\right) = E\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2 - (\bar{X} - \mu)^2\right) \\
 &= \left(\frac{1}{n} E(X_i - \mu)^2 - E(\bar{X} - \mu)^2\right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma^2 - \sigma_{\bar{X}}^2 = \sigma^2 - \frac{\sigma^2}{n} = \frac{n-1}{n} \sigma^2
 \end{aligned}$$

این رابطه نشان می‌دهد که S^2 یک تخمین بی طرفانه از واریانس نمی‌باشد. برای رفع نمودن این مشکل برآورد کننده‌ی واریانس جمعیتی به صورت زیر اصلاح می‌شود.

$$\begin{aligned}
 S^2 \times \frac{n}{n-1} \rightarrow E\left(S^2 \frac{n}{n-1}\right) &= \frac{n}{n-1} E(S^2) = \sigma^2 \\
 \Rightarrow S^2 &= \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{n-1} \quad (3-8)
 \end{aligned}$$

$$S^2 = \frac{1}{N-1} \left(\sum_{i=1}^N X_i^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^N X_j \right)^2 \right)$$

بنابراین تعریف بی طرفانه از واریانس نمونه‌ای بصورت زیر بیان می‌شود، که در این رابطه σ انحراف معیار را نشان می‌دهد.

$$\text{Var}(X) = \sigma^2(X) = \sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2 / (N - 1) \quad (۴-۸)$$

در اینجا سه برآورد کننده‌ی مختلف برای محاسبه‌ی مقدار متوسط کمیت تصادفی X پیشنهاد و مقایسه شده است:

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_1 &= \frac{X_1 + X_2 + X_3}{3} & \langle \bar{\mu}_1 \rangle &= \mu & \text{var}(\bar{\mu}_1) &= \frac{1}{3} \sigma^2 \\ \bar{\mu}_2 &= \frac{X_1 + X_2 + X_3}{4} & \langle \bar{\mu}_2 \rangle &= \frac{3}{4} \mu & \text{var}(\bar{\mu}_2) &= \frac{3}{16} \sigma^2 \\ \bar{\mu}_3 &= \frac{X_1 + 2X_2 + X_3}{4} & \langle \bar{\mu}_3 \rangle &= \mu & \text{var}(\bar{\mu}_3) &= \frac{3}{8} \sigma^2 \end{aligned}$$

۴-۸- واریانس میانگین

در صورتی که یک آزمایش برای چند جمعیت نمونه تکرار شود، میانگین هر آزمایش نسبت به میانگین کل، دارای واریانس خواهد بود که واریانس میانگین نامیده می‌شود. این کمیت با استفاده از رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$\text{Var}(E(X)) = \text{Var}(\bar{X}) = \text{Var}\left(\frac{\sum_{i=1}^n X_i}{N}\right)$$

$$\text{Var}(E(X)) = \sigma_{\bar{X}}^2 = \sigma_X^2/N$$

(۵-۸)

۸-۵- کواریانس

برای بیان وابستگی بین دو کمیت آماری از کواریانس^{۳۴} (هموردی) و ضریب همبستگی^{۳۵} استفاده می‌شود. کواریانس دو کمیت آماری با رابطه (۶-۸) تعریف می‌گردد:

Covariance ۳۴

Correlation coefficient ۲

$$\begin{aligned} Cov(X_1, X_2) &= E[(X_1 - E[X_1])(X_2 - E[X_2])] \\ &= E[X_1 X_2] - \mu_1 \mu_2 \end{aligned} \quad (۶-۸)$$

μ_1 و μ_2 به ترتیب مقدار متوسط X_1 و X_2 می‌باشند. کواریانس دو متغیر تصادفی مستقل، صفر می‌باشد. زیرا برای دو متغیر مستقل رابطه‌ی $E[X_1 X_2] = E[X_1]E[X_2]$ برقرار می‌باشد. البته اگر کواریانس دو کمیت آماری صفر شود، لزوماً به معنای مستقل بودن آنها نمی‌باشد.

با توجه به تعریف کواریانس، واریانس مجموع دو متغیر تصادفی با رابطه‌ی (۷-۸) تعریف می‌گردد.

$$Var[X_1 + X_2] = Var[X_1] + Var[X_2] + 2COV(X_1, X_2) \quad (۷-۸)$$

فرض کنید X_1 یک متغیر تصادفی با متوسط μ_1 و واریانس σ_1^2 و X_2 یک متغیر تصادفی با متوسط μ_2 و واریانس σ_2^2 باشد. ضریب همبستگی (ρ) دو متغیر تصادفی X_1, X_2 با رابطه‌ی (۸-۸) تعریف می‌گردد.

$$\rho = \frac{COV(X_1, X_2)}{\sqrt{\text{var}(X_1) \text{var}(X_2)}} = \frac{E(X_1 X_2) - \mu_1 \mu_2}{\sigma_1 \sigma_2} \quad -1 \leq \rho \leq 1 \quad (8-8)$$

ضریب همبستگی منفی نشان می‌دهد که اگر یک عدد تصادفی بزرگ باشد، متغیر دیگر احتمالاً کوچک می‌باشد. ضریب همبستگی مثبت نشان می‌دهد که اگر یک عدد تصادفی بزرگ باشد، متغیر دیگر احتمالاً باید بزرگ باشد.

۸-۶- تقریب مقدار میانگین و واریانس کمیت آماری وابسته

اگر کمیتی بصورت تابعی از چند کمیت تصادفی دیگر تعریف شده باشد، گاهی اوقات ممکن است محاسبه میانگین و واریانس این کمیت از روش معمول کار دشوار و یا حتی غیر ممکن باشد. در این موارد می‌توان کمیت مورد نظر را با بسط تیلور مرتبه‌ی اول کمیت تصادفی مورد نظر حول مقدار متوسط متغیرها تقریب زده و محاسبه مقدار میانگین و واریانس مربوط به این بسط را محاسبه نمود.

$$X = f(U, V, \dots)$$

بسط تیلور X حول مقادیر متوسط $(\bar{U}, \bar{V}, \dots)$ به صورت زیر می باشد:

$$f(U, V, \dots) = f(\bar{U}, \bar{V}, \dots) + (U - \bar{U}) \left. \frac{\partial f}{\partial U} \right|_{\bar{u}, \bar{v}} + (V - \bar{V}) \left. \frac{\partial f}{\partial V} \right|_{\bar{u}, \bar{v}} + \dots$$

با توجه به بسط فوق و صرف نظر نمودن از جملات مرتبه‌ی دوم به بعد داریم:

$$\bar{X} = \bar{f}(U, V, \dots) \approx f(\bar{U}, \bar{V}, \dots)$$

واریانس این مقدار بصورت زیر بیان می شود:

$$\begin{aligned} \text{var}(X) &= E[(X - \bar{X})^2] \approx E\left[\left((U - \bar{U}) \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{\bar{u}, \bar{v}} + (V - \bar{V}) \left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{\bar{u}, \bar{v}}\right)^2\right] \\ &= E\left[\left((U - \bar{U}) \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{\bar{u}, \bar{v}}\right)^2\right] + E\left[\left((V - \bar{V}) \left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{\bar{u}, \bar{v}}\right)^2\right] + E\left[2(U - \bar{U})(V - \bar{V}) \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{\bar{u}, \bar{v}} \left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{\bar{u}, \bar{v}}\right] \\ &= \text{var}(U) \left(\left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{\bar{u}, \bar{v}}\right)^2 + \text{var}(V) \left(\left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{\bar{u}, \bar{v}}\right)^2 + 2 \text{cov}(U, V) \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{\bar{u}, \bar{v}} \left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{\bar{u}, \bar{v}} \end{aligned}$$

به طور مشابه رابطه‌ی تقریبی واریانس نمونه‌ای متغیر وابسته به صورت زیر بدست می‌آید.

$$X_i = f(U_i, V_i)$$

$$X_i - \bar{X} \cong (U_i - \bar{U}) \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial U} \right) + (V_i - \bar{V}) \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial V} \right)$$

با استفاده از این تعریف رابطه زیر برای واریانس X حاصل می‌شود:

$$S_x^2 \cong \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left[(U_i - \bar{U}) \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial U} \right) + (V_i - \bar{V}) \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial V} \right) \right]^2$$

با استفاده از بسط دو جمله‌ای داریم:

$$S_x^2 \cong \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left[(U_i - \bar{U})^2 \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial u} \right)^2 + (V_i - \bar{V})^2 \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial v} \right)^2 + 2(U_i - \bar{U})(V_i - \bar{V}) \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial U} \right) \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial V} \right) \right]$$

از طرفی روابط زیر را می توان برای انحراف معیار جملات U_i و V_i بیان کرد:

$$S_U^2 \equiv \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (U_i - \bar{U})^2$$

$$S_V^2 \equiv \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (V_i - \bar{V})^2$$

$$S_{UV}^2 \equiv \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N [(U_i - \bar{u})(V_i - \bar{v})]$$

که با استفاده از این روابط واریانس X بصورت زیر بدست می آید:

$$S_X^2 = S_u^2 \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial \bar{U}} \right)^2 + S_v^2 \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial \bar{V}} \right)^2 + 2 \times S_{uv}^2 \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial \bar{U}} \right) \left(\frac{\partial \bar{X}}{\partial \bar{V}} \right) \quad (9-8)$$

۸-۷- میانگین ساده چند تخمین گر

چنانچه برای تخمین کمیتی مانند μ از چند برآورد کننده استفاده شود (مثلا برآورد کننده X و Y و Z)، هر یک از این برآورد کننده‌ها دارای واریانس‌های مطابق روابط زیر می‌باشند.

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N} ; var(x) = \sigma_x^2 = \frac{N}{N-1} \left\{ \frac{\sum_{j=1}^N x_j^2}{N} - \bar{x}^2 \right\} ; \sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{\sigma_x^2}{N}$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{N} ; var(y) = \sigma_y^2 = \frac{N}{N-1} \left\{ \frac{\sum_{j=1}^N y_j^2}{N} - \bar{y}^2 \right\} ; \sigma_{\bar{y}}^2 = \frac{\sigma_y^2}{N}$$

$$\bar{z} = \frac{\sum_{i=1}^N z_i}{N} ; var(z) = \sigma_z^2 = \frac{N}{N-1} \left\{ \frac{\sum_{j=1}^N z_j^2}{N} - \bar{z}^2 \right\} ; \sigma_{\bar{z}}^2 = \frac{\sigma_z^2}{N}$$

کمیت μ ، را می‌توان با استفاده از میانگین‌گیری ساده از سه برآورد کننده فوق بصورت زیر محاسبه نمود:

$$\mu = \frac{\bar{x} + \bar{y} + \bar{z}}{3} \quad (10-8)$$

۸-۸- میانگین وزن شده^{۳۶}

در این روش با ترکیبی از برآورد کننده‌های ممکن، تخمین‌گری برای کمیت μ با کمترین انحراف معیار بدست می‌آید. کمیت μ را می‌توان با استفاده از میانگین‌گیری وزن شده از سه برآورد کننده فوق بصورت زیر محاسبه نمود:

$$\mu = a\bar{x} + b\bar{y} + c\bar{z} \quad (11-8)$$

$$a + b + c = 1$$

واریانس برآورد کننده‌ی فوق به صورت زیر می‌باشد:

$$Var(\mu) = a^2 Var(\bar{x}) + b^2 Var(\bar{y}) + c^2 Var(\bar{z}) + 2ab Cov(\bar{x}, \bar{y}) + 2ac Cov(\bar{x}, \bar{z}) + 2bc Cov(\bar{y}, \bar{z})$$

covariance-weighted average^{۳۶}

برای کمینه کردن مقدار واریانس $Var(\mu) = f(a, b, c)$ با توجه به قید $\varphi(a, b, c) = a + b + c - 1 = 0$ می توان از روش ضرایب لاگرانژ به صورت زیر استفاده کرد:

$$\nabla f + \lambda \nabla \varphi = 0$$

$$2 Var(\bar{x}) a + 2 Cov(\bar{x}, \bar{y}) b + 2 Cov(\bar{x}, \bar{z}) c + \lambda = 0$$

$$2 Cov(\bar{x}, \bar{y}) a + 2 Var(\bar{y}) b + 2 Cov(\bar{y}, \bar{z}) c + \lambda = 0$$

$$2 Cov(\bar{x}, \bar{z}) a + 2 Cov(\bar{y}, \bar{z}) b + 2 Var(\bar{z}) c + \lambda = 0$$

$$a + b + c = 1$$

با حل این دستگاه معادلات مقادیر a, b, c محاسبه می شود. برای سادگی می توان رابطه مربوط به این سه پارامتر را بصورت زیر نشان داد:

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^3 a_i X_i}{\sum_{i=1}^3 a_i} \quad (۱۲-۸)$$

$$a_i = Cov(X_j, X_j) * Var(X_k) - Var(X_j) * Cov(X_i, X_k) - Var(X_k) * Cov(X_i, X_j) + Cov(X_j, X_k) \\ * (Cov(X_i, X_j) + Cov(X_i, X_k) - Cov(X_j, X_k))$$

۸-۹- روش مونت کارلو

روش مونت کارلو یک روش آماری برای حل مسائل ریاضی و فیزیکی می باشد. مونت کارلو روشی است که در آن متوسط جمعیتی با متوسط نمونه‌ای تقریب زده می شود. در روش مونت کارلو علاوه بر اینکه مقدار مورد انتظار یک متغیر تصادفی تخمین زده می شود (با استفاده از قانون اعداد بزرگ^{۳۷})، می توان میزان دقت (عدم قطعیت) این تخمین را نیز محاسبه نمود (با استفاده از تئوری حد مرکزی^{۳۸}). روش مونت کارلو بر پایه دو اصل قانون اعداد بزرگ و قضیه حد مرکزی استوار می باشد.

۳۷ The law of large numbers

۳۸ The central limit theorem

۸-۹-۱- قانون اعداد بزرگ

این قانون بیانگر آن است که با تعداد زیادی از آزمایشات، مقدار متوسط نمونه‌ای برای یک کمیت آماری به مقدار چشمداشتی آن نزدیک می‌شود. (چنانچه مقدار متوسطی برای یک کمیت تصادفی وجود داشته و نیز واریانس آن محدود باشد)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{Z} = \langle Z \rangle$$

این قانون دارای دو بیان ضعیف و قوی می‌باشد. بیان ضعیف قانون اعداد بزرگ به صورت زیر می‌باشد، این قانون چگونگی همگرایی یک دنباله‌ای از احتمالات را بیان می‌دارد. (ϵ یک مقدار مثبت)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(|\bar{Z} - \langle Z \rangle| \geq \epsilon) = 0$$

بیان قوی قانون اعداد بزرگ به صورت زیر می‌باشد. این قانون چگونگی رفتار حدی دنباله‌ای از متغیرهای تصادفی مشابه را بیان می‌کند. (ε یک مقدار مثبت و کوچک)

$$P(\lim_{N \rightarrow \infty} |\bar{Z} - \langle Z \rangle| \geq \varepsilon) = 0$$

۸-۹-۲- قضیه حد مرکزی

این تئوری بیانگر آن است که برای تعداد زیادی از نمونه‌های مستقل از هر تابع توزیعی (با مقدار میانگین و واریانس محدود)، مجموع آن به توزیع نرمال نزدیک می‌شود. البته این تئوری در حالتی که این نمونه‌ها مستقل نباشند به شرطی که هر یک از آنها در حاصل جمع اثر کمی داشته باشد، نیز برقرار می‌باشد.

$$\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i - \mu \right) \xrightarrow{d} N(0, \sigma^2)$$

در روش مونت کارلو با استفاده از تئوری حد مرکزی می توان میزان عدم قطعیت تخمین را محاسبه نمود، بعبارتی میزان دقت در روش مونت کارلو با استفاده از تئوری حد مرکزی مشخص می گردد.

برای روشن شدن اصول روش مونت کارلو، فرض می شود می خواهیم مقدار متوسط یک متغیر تصادفی همانند ξ را برآورد کنیم. برای انجام دادن اینکار، N متغیر تصادفی $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ با توزیع مشابه با ξ در نظر گرفته می شود.

$$E\xi_1 = E\xi_2 = \dots = E\xi_N = m = \langle \xi \rangle$$

$$\text{Var}\xi_1 = \text{Var}\xi_2 = \dots = \text{Var}\xi_N = b^2$$

با استفاده از قضیه حد مرکزی می دانیم که اگر N به اندازه ی کافی بزرگ باشد، آنگاه مجموع این متغیرها (ρ_N) دارای تابع توزیع نرمال می باشد. روابط (۸-۱۳) برای مجموع این متغیرها برقرار می باشد.

$$\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N = \rho_N$$

$$E\rho_N = Nm \quad (13-8)$$

$$\text{Var}\rho_N = Nb^2$$

با استفاده از قانون سه سیگما و قضیه حد مرکزی رابطه‌ی (۱۴-۸) برای مجموع این متغیرها برقرار خواهد بود.

$$P\{Nm - 3b\sqrt{N} < \sum_{i=1}^N \xi_i < Nm + 3b\sqrt{N}\} \approx 0.997 \quad (14-8)$$

اگر طرفین نامساوی داخل پرانتز را بر N تقسیم کنیم، مقدار احتمال تغییری نمی‌کند و رابطه‌ی (۱۴-۸) به رابطه‌ی (۸-۱۵) تبدیل می‌شود.

$$P\left\{m - \frac{3b}{\sqrt{N}} < \frac{\sum_{i=1}^N \xi_i}{N} < m + \frac{3b}{\sqrt{N}}\right\} \approx 0.997 \quad (15-8)$$

$$\rightarrow P\left\{\left|\frac{\sum_{i=1}^N \xi_i}{N} - m\right| < \frac{3b}{\sqrt{N}}\right\} \approx 0.997$$

این رابطه، رابطه مهمی در روش مونت کارلو می باشد. این رابطه بیان می دارد که اگر m را با متوسط حسابی تقریب بزنییم، خطا بیش از $\frac{3b}{\sqrt{N}}$ نمی گردد. بعبارتی دیگر اگر مقدار متوسط $\langle \xi \rangle$ با متوسط نمونه‌ای $\bar{\xi} = \frac{\sum_{i=1}^N \xi_i}{N}$ تقریب زده شود، آنگاه بر اساس رابطه‌ی (۱۵-۸) مقدار واریانس این تقریب به صورت زیر بدست می آید.

$$var(\bar{\xi}) = \frac{var(\xi)}{N} \quad (16-8)$$

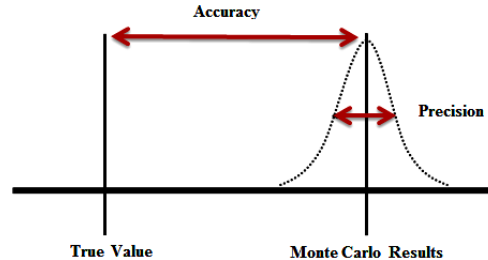
در محاسبات مونت کارلو انحراف معیار نتایج به ازای مقادیر بزرگ N متناسب با $1/\sqrt{N}$ می باشد. بنابراین برای کاهش انحراف معیار به نصف مقدارش، باید تعداد تاریخچه ها را چهار برابر نمود، این موضوع در واقع یکی از ضعف های ذاتی روش مونت کارلو در بدست آوردن دقت بالا در نتایج می باشد. یک رهیافت دیگر برای کاهش مقدار انحراف معیار $S(\bar{\xi}) = \frac{S(\xi)}{\sqrt{N}}$ ، کوچک تر نمودن مقدار $S(\xi)$ می باشد. برای انجام این کار باید گستره ی پراکندگی نتایج را به نحوی کاهش داد. با اصلاح روند شبیه سازی مسائل از روش های مختلف، می توان واریانس نتایج را کاهش داد.

۸-۱۰- دقت^{۳۹} و صحت^{۴۰} در محاسبات موننت کارلو

دو عبارت دقت و صحت غالباً در محاورات به جای یکدیگر به کار می‌روند، اگرچه تفاوت مهمی بین این دو وجود دارد. در موننت کارلو، دقت در محاسبه مقدار متوسط نمونه‌ای یک کمیت (تقریبی از مقدار متوسط جامعه‌ای یا همان مقدار متوسط درست) به علت وجود عدم قطعیت ناشی از افت و خیز آماری در نمونه‌برداری از آن کمیت محدود می‌شود. این عدم قطعیت به صورت انحراف معیار اندازه‌گیری می‌شود. چنانچه تعداد نمونه‌ها افزایش یابد، انحراف معیار کاهش می‌یابد و تقریب دقیق‌تری برای مقدار متوسط نمونه‌ای یک کمیت بدست می‌آید. میزان صحت در محاسبات موننت کارلو به صورت اختلاف بین مقدار متوسط نمونه‌ای تخمین زده شده توسط روش موننت کارلو با مقدار صحیح این کمیت تعریف می‌شود. میزان این اختلاف در حد نمونه‌های بسیار زیاد (بی‌نهایت) خطای سیستماتیک نامیده می‌شود.

Precision ۳۹

Accuracy ۴۰



شکل ۴۶: نمایشی از تفاوت بین دقت و صحت نتایج آماری

این امر کاملاً امکان پذیر می باشد که در روش مونت کارلو یک نتیجه ی بسیار دقیق اما در عین حال نادرست برای برآورد یک کمیت بدست بیاید. این امر می تواند ناشی از خطای مدل شبیه سازی شده، خطای کاربر و یا خطای ناشی از دوره تناوب پایین تکرار اعداد تصادفی باشد.

در واقع دقت نشان دهنده ی میزان اختلاف هر اندازه گیری از مقدار متوسط اندازه گیری ها می باشد و صحت نشان دهنده ی میزان اختلاف مقدار متوسط اندازه گیری ها از مقدار متوسط درست می باشد.

به طور کلی دستیابی به هر دقت دلخواهی در نتایج، با افزایش تعداد نمونه‌ها قابل دستیابی می‌باشد. اما به دلیل وجود خطای گرد کردن^{۴۱} در محاسبات رایانه‌ای (اعداد در رایانه‌ها با تعداد ارقام محدودی نشان داده می‌شوند)، دستیابی به هر دقت دلخواه امکان‌پذیر نمی‌باشد. به عنوان مثال دو کمیت S_1 و S_2 را به صورت زیر در نظر می‌گیریم. (ρ_i) یک عدد تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه‌ی صفر و یک می‌باشد)

$$S_1 = \sum_{i=1}^N \frac{1}{N}, \quad S_2 = \sum_{i=1}^N \frac{2\rho_i}{N}$$

مقدار مورد انتظار این دو کمیت مستقل از مقدار N برابر یک می‌باشد. نتایج محاسبه‌ی این دو کمیت با استفاده از رایانه ۳۲ بیتی با دقت واحد^{۴۲} به ازای مقادیر N در جدول زیر آمده است

Round off error ۴۱

Single Precision ۴۲

جدول شماره ۷: خطای گرد کردن در مقادیر محاسبه شده توسط رایانه برای دو کمیت با مقدار متوسط یک

N	$S_1 = \sum_{i=1}^N (1/N)$	$S_2 = \sum_{i=1}^N (2\rho_i/N)$
10	1.0000000	1.1705571
30	1.0000000	0.9968364
10 ²	1.0000000	0.9874166
3×10 ²	1.0000000	1.0246525
10 ³	1.0000000	0.9853277
3×10 ³	1.0000000	1.0023125
10 ⁴	1.0000000	0.9994981
3×10 ⁴	1.0000000	1.0018269
10 ⁵	1.0000000	0.9994974
3×10 ⁵	1.0000000	1.0000912
10 ⁶	1.0000000	1.0002490
3×10 ⁶	1.0000000	0.9999786
10 ⁷	1.0000000	1.0001853
10 ⁸	0.1677722	0.3355443
3×10 ⁸	0.0559241	0.1118481
10 ⁹	0.0167772	0.0335544

به ازای مقادیر N بزرگتر از 10^7 در نتایج خطا مشاهده می‌شود، علت این امر تجمع خطاهای گرد کردن می‌باشد. برای رهایی از این مشکل باید برای حالت‌هایی که تعداد نمونه‌ها زیاد می‌باشد از محاسبات با دقت مضاعف^{۴۳} استفاده نمود. این روش می‌تواند باعث افزایش زمان اجرای کد گردد. یک روش دیگر برای کاهش خطاهای گرد کردن، در حالتی که شمارنده از نظر مقدار در گستره‌ی زیادی تغییر می‌کند، بدین صورت می‌باشد که شمارنده‌های با مقادیر بزرگ و مقادیر کوچک به طور جداگانه جمع بسته شوند، در نهایت مقدار متوسط شمارنده با جمع بستن مقادیر از کوچک به بزرگ بدست می‌آید. یک روش دیگر انجام M محاسبات مستقل مونت کارلو هر یک با رشته اعداد تصادفی متفاوت و مقداری از N که باعث ظهور خطای گرد کردن نمی‌شود، می‌باشد، با این کار مقدار چشمداشتی شمارنده با متوسط‌گیری نمودن میان M نتیجه بدست آمده، حاصل می‌شود. (یکی از فواید این روش محاسبه مقدار انحراف معیار در مقدار متوسط به طور مستقیم توسط M نتیجه می‌باشد)

۸-۱۱- ارزیابی آماری نتایج

برای ارزیابی میزان مقبولیت یک برآورد از مقدار متوسط، چندین محک آماری وجود دارد. یکی از این محک‌ها انحراف معیار می‌باشد. یک نتیجه‌ی قابل قبول باید دارای انحراف معیار کوچک باشد. اینکه انحراف معیار چه اندازه باید کوچک باشد تا نتایج مونت کارلو از دقت قابل قبولی برخوردار باشد، یک سوال مهم در شبیه‌سازی می‌باشد. برای اطمینان یافتن از دقت محاسبات چند کمیت آماری دیگر از تاریخچه‌ها باید محاسبه و ارزیابی شوند.

۸-۱۱-۱- خطای نسبی

خطای نسبی به صورت زیر تعریف می‌شود. این کمیت آماری، معیاری از دقت آماری نتایج به مقدار متوسط تخمین زده می‌باشد.

$$R = \frac{s(\bar{z})}{\bar{z}} = \frac{\sqrt{z^2 - \bar{z}^2}}{\bar{z}\sqrt{N-1}} \quad (17-8)$$

اگر تمامی $z_i = z(x_i)$ برابر باشند، آنگاه خطای نسبی برابر صفر می‌باشد. اگر تمامی $z_i = 0$ باشند، آنگاه خطای نسبی برابر صفر تعریف می‌شود. اگر فقط یک مقدار z_i غیر صفر وجود داشته باشد، آنگاه در حد تعداد تاریخچه‌ی زیاد، خطای نسبی به سمت یک میل می‌کند. اگر تمامی نمونه‌ها هم‌علامت باشند، آنگاه خطای نسبی کوچک‌تر از یک می‌باشد. بنابراین خطای نسبی برای نمونه‌های هم‌علامت همواره بین صفر و یک می‌باشد. هر چه مقدار خطای نسبی کمتر باشد، نتایج از دقت بیشتری برخوردارند. نوعاً نتایج خوب و قابل قبول باید دارای مقدار خطای نسبی کمتر از 0.05 باشند.

۸-۱۱-۲- شاخص شایستگی^{۴۴}

یک محک آماری مفید دیگر برای نتایج محاسبات مونت کارلو، محاسبه‌ی شاخص شایستگی می‌باشد. شاخص شایستگی به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$FOM = \frac{1}{T R^2}$$

T برابر با زمان مورد نیاز برای تولید N تاریخچه می‌باشد. از آنجایی که T متناسب با N و همچنین R² متناسب با $\frac{1}{N}$ می‌باشد، لذا انتظار می‌رود تا FOM در طول اجرای مونت کارلو بجز در اوایل اجرا (به دلیل افت و خیز آماری) تقریباً ثابت باشد. این محک چند کاربرد مفید دارد. اولاً اگر FOM در طول اجرا ثابت نباشد، ممکن است بازه‌ی اطمینان^{۴۵} تخمین

۴۴ Figure Of Merit (FOM)

۴۵ Confidence Interval

کمیت شامل مقدار مورد انتظار کمیت نباشد. ثانیاً با اجراهای کوتاه یک مسئله با روش‌های مختلف، به عنوان مثال با روش‌های کاهش واریانس مختلف، خیلی سریع می‌توان روش بهتر یا روشی که برای یک زمان محاسبه‌ی ثابت دارای بیشترین مقدار FOM باشد را تشخیص داد. ثالثاً با استفاده از FOM می‌توان زمان مورد نیاز برای دستیابی به یک میزان مشخصی از خطای نسبی را برآورد نمود.

۸-۱۱-۳- واریانس واریانس نسبی^{۴۶}

یکی دیگر از محک‌های آماری برای ارزیابی میزان دقت نتایج مونت کارلو، واریانس خطای نسبی یا واریانس واریانس نسبی می‌باشد. واریانس خطای نسبی به صورت زیر تعریف می‌شود:

Variance Of the Variance (VOV) ۴۶

$$VOV = \frac{S^4(\bar{Z})}{S^2(S^2(\bar{Z}))} = \frac{\sum_{i=1}^N (Z_i - \bar{Z})^4}{(\sum_{i=1}^N (Z_i - \bar{Z})^2)^2} - \frac{1}{N}$$

برای محاسبه‌ی این کمیت باید در طول اجرا چهار کمیت زیر را جمع‌آوری نمود.

$$S_m = \sum_{i=1}^N (Z_i)^m ; m = 1,2,3,4$$

$$VOV = \frac{S_4 - \frac{4S_1S_3}{N} + 8S_2\left(\frac{S_1}{N}\right)^2 - \frac{4S_1^4}{N^3} - \frac{S_2^2}{N}}{\left(S_2 - \frac{S_1^2}{N}\right)^2} = \frac{4S_1^2(2NS_2 - S_1^2) + N^2(-4S_1S_3 - S_2^2 + NS_4)}{N(S_1^2 - NS_2)^2}$$

اگر VOV کمتر از 0.1 باشد، شانس دستیابی به بازه‌ی اطمینان قابل قبول را افزایش می‌دهد. مقدار VOV به صورت تابع

$\frac{1}{N}$ کاهش می‌یابد.

به طور خلاصه برای دستیابی به یک نتیجه قابل قبول شرایط زیر باید برقرار باشد:

۱. مشاهده یک رفتار غیریکنواخت (نه گرایش به بالا نه گرایش به پایین) در مقدار متوسط برآورد شده نسبت به افزایش N برای نیمه‌ی پایانی مسئله.
۲. بدست آمدن خطای نسبی مناسب که به نوع مسئله وابسته می‌باشد. (کمتر از ۰.۰۵، البته در مقدار ضریب تکثیر این مقدار باید کمتر باشد)
۳. مشاهده یک رفتار یکنواخت کاهشی ($\frac{1}{\sqrt{N}}$) در مقدار خطای نسبی برآورد شده نسبت به افزایش N برای نیمه‌ی پایانی مسئله.
۴. بزرگی VOV باید کمتر از ۰.۱ باشد.

۵. مشاهده یک رفتار یکنواخت کاهشی ($\frac{1}{N}$) در مقدار VOV برآورد شده نسبت به افزایش N برای نیمه‌ی پایانی مسئله.

۶. مشاهده یک مقدار ثابت از منظر آماری برای کمیت FOM نسبت به افزایش N برای نیمه‌ی پایانی مسئله.

۷. مشاهده یک رفتار غیریکنواخت (نه گرایش به بالا نه گرایش به پایین) در مقدار FOM نسبت به افزایش N برای نیمه‌ی پایانی مسئله.

۹- محاسبات بحرانی و روش توانی^{۴۷}

معادله ویژه مقداری k را می‌توان به فرم عملگری با رابطه‌ی (۹-۱) بیان نمود.

$$\mathbf{L}N_k = \frac{1}{k} \mathbf{F}N_k \quad (1-9)$$

این معادله می تواند به صورت رابطه‌ی (۲-۹) بازنویسی شود.

$$N_k = \frac{1}{k} \mathbf{L}^{-1} \mathbf{F}N_k = \frac{1}{k} \mathbf{M}N_k \quad (2-9)$$

معادله‌ی (۲-۹) به صورت عددی با روش استاندارد تکرار توانی به صورت روابط (۳-۹) قابل حل است.

$$N_k^{(n+1)} = \frac{1}{k^{(n)}} \mathbf{M}N_k^{(n)} \quad ; \quad n = 0, 1, \dots \quad \text{given } k^{(0)} \text{ and } N_k^{(0)}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} k^{(n)} \rightarrow k \quad ; \quad \lim_{n \rightarrow \infty} N_k^{(n)} \rightarrow N_k \quad (3-9)$$

از نظر مفهومی این فرآیند ریاضی برای محاسبه‌ی ضریب تکثیر را می توان هم‌ارز حل معادله ترابرد نسلی دانست.

$$L_G \tilde{N}_1 = \tilde{Q}_1(r, \Omega, E) = F_G \tilde{N}_0$$

$$L_G \tilde{N}_i = F_G \tilde{N}_{i-1} ; i > 1 \quad (۴-۹)$$

ضریب تکثیر را می توان حتی قبل از رسیدن سیستم به مد پایه به صورت نسبت کل نوترون های چشمه در دو نسل متوالی مطابق رابطه ی (۵-۹) برآورد نمود. عبارت \tilde{N}_i در فرمول (۵-۹) بر روی فضای فاز انتگرال گیری شده است، زیرا در نسل های اولیه توزیع مکانی چشمه از یک نسل به نسل دیگر متفاوت می باشد.

$$\frac{\tilde{N}_i}{\tilde{N}_{i-1}} = k_i \rightarrow \lim_{i \rightarrow \infty} k_i = k \quad (۵-۹)$$

البته برای جلوگیری از واگرایی چشمه نوترونی (محدودیت حافظه رایانه)، در هر مرحله مقدار چشمه به ضریب تکثیر بدست آمده از مرحله ی قبل تقسیم می شود.

$$\mathbf{L}_G \tilde{N}_1 = \tilde{Q}_1(r, \Omega, E) = \frac{1}{k^{(0)}} \mathbf{F}_G \tilde{N}_0$$

$$\mathbf{L}_G \tilde{N}_i = \frac{1}{k^{(i-1)}} \mathbf{F}_G \tilde{N}_{i-1}; \quad i > 1$$

$$\frac{\tilde{N}_i}{\tilde{N}_{i-1}} = k_i$$

روش تکرار چشمه در شبیه‌سازی مونت کارلو به نوعی معادله‌ی نسل‌ها را شبیه‌سازی می‌کند که در هر نسل نمونه‌ای از جمعیت اصلی شبیه‌سازی می‌شود و برای برآورد ویژه تابع و ویژه مقدار مد پایه از اطلاعات مربوط به چند نسل که به مد پایه نزدیک شده‌اند استفاده می‌شود. لذا در روش مونت کارلو تعدادی از نسل‌های اول که از مد پایه دور هستند در برآورد مقادیر، کنار گذاشته می‌شوند.

۹-۱- همگرایی روش توانی

در این بخش به همگرایی ضریب تکثیر و جمعیت نسلی نوترون (چشمه شکافت) می پردازیم.

$$N_k = \frac{1}{k} \mathbf{M} N_k \quad ; \quad N_k^{(n+1)} = \frac{1}{k^{(n)}} \mathbf{M} N_k^{(n)}, \quad n = 0, 1, \dots \quad \text{حدس اولیه } k^{(0)} \text{ و } N_k^{(0)}$$

N_k (ویژه تابع معادله ویژه مقداری k ، یا جمعیت نسلی انتگرال گیری شده بعد از رسیدن به مد پایه ای $i \rightarrow \infty$) $(\tilde{N}_i ; i \rightarrow \infty)$ می تواند بر حسب ویژه بردارهای عملگر \mathbf{M} (N_{k_i}) به صورت رابطه ی (۹-۶) بسط داده شود. برای سادگی N_k را به صورت N نمایش می دهیم.

$$N_i = \frac{1}{k} \mathbf{M} N_i$$

$$N = \sum_{i=0}^{\infty} a_i N_i = a_0 N_0 + a_1 N_1 + \dots \quad (۹-۶)$$

همچنین حدس اولیه برای چشمه می تواند بر حسب ویژه بردارهای عملگر M به صورت رابطه‌ی (۷-۹) بسط داده شود.

$$N^{(0)} = \sum_{i=0}^{\infty} a_i^{(0)} N_i = a_0^{(0)} N_0 + a_1^{(0)} N_1 + \dots \quad (7-9)$$

آنگاه مقدار جدید چشمه (انتگرال زمانی جمعیت نوترون در هر نسل) در انتهای نسل n ام با رابطه‌ی (۸-۹) بیان می شود.

$$\begin{aligned} N^{(n+1)} &= \frac{1}{k^{(n)}} \mathbf{M} N^{(n)} = \frac{1}{k^{(n)}} \dots \frac{1}{k^{(0)}} \mathbf{M}^{(n+1)} (N^{(0)}) = \frac{1}{k^{(n)}} \dots \frac{1}{k^{(0)}} \mathbf{M}^{(n+1)} (a_0^{(0)} N_0 + a_1^{(0)} N_1 + \dots) \\ &= \frac{1}{k^{(n)}} \dots \frac{1}{k^{(0)}} [(a_0^{(0)} k_0^{(n+1)} N_0 + a_1^{(0)} k_1^{(n+1)} N_1 + \dots)] \\ &= k_0^{(n+1)} \left(\frac{1}{k^{(n)}} \dots \frac{1}{k^{(0)}} \right) a_0^{(0)} (N_0 + \left(\frac{a_1^{(0)}}{a_0^{(0)}} \right) \left(\frac{k_1}{k_0} \right)^{n+1} a_1^{(0)} N_1 \\ &\quad + \left(\frac{a_2^{(0)}}{a_0^{(0)}} \right) \left(\frac{k_2}{k_0} \right)^{n+1} a_2^{(0)} N_2 + \dots) \end{aligned} \quad (8-9)$$

در این رابطه k_0 بزرگ‌ترین ویژه مقدار معادله‌ی ویژه مقداری k یا همان مقداری است که به ازای آن سیستم به طور مصنوعی بحرانی می‌شود.

$$k_0 > k_1 > k_2 > \dots$$

مقدار ضریب تکثیر در انتهای نسل n ام با استفاده از رابطه (۹-۹) اصلاح می‌شود.

$$\begin{aligned}
 k^{(n+1)} &= \frac{N^{(n+1)}}{\frac{N^{(n)}}{k^{(n)}}} = k_0 \left[\frac{1 + \left(\frac{a_1^{(0)}}{a_0^{(0)}}\right) \left(\frac{k_1}{k_0}\right)^{n+1} G_1 + \left(\frac{a_2^{(0)}}{a_0^{(0)}}\right) \left(\frac{k_2}{k_0}\right)^{n+1} G_2 + \dots}{1 + \left(\frac{a_1^{(0)}}{a_0^{(0)}}\right) \left(\frac{k_1}{k_0}\right)^n G_1 + \left(\frac{a_2^{(0)}}{a_0^{(0)}}\right) \left(\frac{k_2}{k_0}\right)^n G_2 + \dots} \right] \\
 &\cong k_0 \left[1 + \left(\frac{a_1^{(0)}}{a_0^{(0)}}\right) \left(\frac{k_1}{k_0}\right)^{n+1} G_1 \right] \left[1 - \left(\frac{a_1^{(0)}}{a_0^{(0)}}\right) \left(\frac{k_1}{k_0}\right)^n G_1 \right] \\
 &\cong k_0 \left[1 + \left(\frac{a_1^{(0)}}{a_0^{(0)}}\right) \left(\frac{k_1}{k_0}\right)^n \left(\frac{k_1}{k_0} - 1\right) G_1 \right] \quad (9-9)
 \end{aligned}$$

در این رابطه کمیت G_i به صورت زیر تعریف می‌گردد: (انتگرال گیری روی فضای فاز انجام می‌پذیرد)

$$G_i = \frac{\int N_i dv}{\int N_0 dv}$$

همانطور که در این روابط مشهود است، مقدار $\frac{k_1}{k_0}$ (نسبت غلبه^{۴۸}) میزان همگرایی به مد پایه را نشان می‌دهد. اگر نسبت غلبه بسیار کوچک باشد آنگاه، چشمه و ضریب تکثیر خیلی سریع به ترتیب به ویژه تابع پایه N_0 و به ویژه مقدار پایه k_0 همگرا می‌شوند. برای سیستم‌هایی با نسبت غلبه نزدیک به یک، به دلیل وجود ضریب $\left(\frac{k_1}{k_0} - 1\right)$ در معادله‌ی (۹-۹)، همگرایی ضریب تکثیر سریع‌تر از چشمه می‌باشد، بنابراین برای مسئله‌ای با نسبت غلبه بالا، ممکن است ضریب تکثیر همگرا شود در حالی که توزیع چشمه همگرا نشده باشد.

۱۰- شبیه‌سازی محاسبات بحرانیت

برای شبیه‌سازی ترابرد نوترون در سیستم، جمعیت نمونه‌ای از نوترون‌ها در نظر گرفته شده و سرنوشت این جمعیت نمونه در سیستم پیگیری می‌شود، و در حین پیگیری سرنوشت هر نوترون، وقایع مورد نظر ثبت و با استفاده از برآورد کننده‌های آماری، کمیت‌های مطلوب نیز برآورد می‌شوند.

از آنجائی که محاسبات بحرانیت، در حالت پایه^{۴۹} جمعیت نوترونی در سیستم انجام می‌پذیرد لذا برای شبیه‌سازی این حالت باید نمونه‌ای از جمعیت نوترون در حالت پایه انتخاب شده و سرنوشت آنها شبیه‌سازی شود تا بتوان کمیت‌هایی همچون ضریب تکثیر موثر سیستم، شار نوترونی در حالت پایه و ... را برآورد نمود. از آنجائی که توزیع جمعیت نوترونی در حالت پایه قبل از انجام محاسبات ناشناخته می‌باشد، به نوعی باید این توزیع جمعیتی را در سیستم تولید نمود و بعد از

تولید جمعیت نوترون در حالت پایه با استفاده از برآورد کننده‌های آماری، کمیت‌های مطلوب را بدست آورد. در این کد از روش تکرار چشمه^{۵۰} برای شبیه‌سازی محاسبات بحرانی استفاده شده است. در این روش، محاسبات به صورت نسلی انجام می‌شود، تعدادی از نسل‌های اولیه برای رسیدن به حالت پایه توزیع جمعیت نوترونی در سیستم پیگیری می‌شوند و بعد از رسیدن توزیع نوترونی به حالت پایه، نسل‌های دیگری که هر کدام به مثابه یک آزمایش یا نمونه از توزیع حالت پایه سیستم می‌باشد پیگیری شده و نتایج مورد نظر از سیستم بحرانی در این نسل‌ها برآورد می‌شود. نسل‌هایی که در آنها توزیع جمعیت نوترونی به حالت پایه نرسیده است نسل‌های غیرفعال نامیده شده و در نتایج متوسط نهایی به حساب نمی‌آیند. نسل‌های فعال به نسل‌هایی گفته می‌شود که در آنها توزیع جمعیت نوترونی به حالت پایه رسیده است و نتایج نهایی با متوسط‌گیری از نتایج این نسل‌ها بدست می‌آیند.

به طور کلی در این روش یک چشمه‌ی شکافت اولیه با توزیع مکانی دلخواه در سیستم در نظر گرفته می‌شود، آنگاه سرنوشت این چشمه‌ها تا زمان فرار و یا جذب در محیط پیگیری می‌شود و در حین پیگیری سرنوشت چشمه‌ها در سیستم با استفاده از برآورد کننده‌ای تعداد نوترون‌های تولید شده به عنوان چشمه نسل بعدی ذخیره می‌شود.

پیگیری سرنوشت نوترون از زمان تولدش در یک چشمه شکافت شروع می‌شود. در اولین گام، راستای حرکت نوترون به طور تصادفی انتخاب شده و سپس نوترون تازه متولد شده بعد از طی مسافتی تصادفی در راستای حرکتش در درون سیستم، وارد واکنش شده و یا از سیستم خارج می‌گردد. در نقطه‌ی برخورد واکنش جذب و یا پراکندگی رخ می‌دهد. پراکندگی ممکن است باعث تغییر در راستای حرکت و گروه انرژی نوترون شده و همچنین برخورد جذب ممکن است باعث تولید ذرات جدید دیگری شود که در نسل بعد پیگیری می‌شوند و یا حقیقتاً به عمر نوترون خاتمه دهد. این فرآیند

تا زمانی که نوترون جذب یا از سیستم خارج شود ادامه پیدا می کند. مدت زمان حیات یک نوترون در یک نسل، تاریخچه^{۵۱} نوترون نامیده می شود.

۱-۱۰- شبیه سازی چشمه شکافت

در هر نسل، نوترون ها حیات خود را از چشمه ی شکافت آغاز می کنند، بنابراین در اولین گام برای شبیه سازی ترابرد نوترون باید مکان نوترون، راستای حرکت نوترون و گروه انرژی نوترون خارج شده از چشمه شکافت مشخص شود. برای این کار از توابع توزیع خاصی نمونه برداری صورت می پذیرد که در ادامه به آنها اشاره می شود.

۱۰-۱-۱- وزن چشمه‌ی نوترونی

در محاسبات برای چشمه‌های نوترونی، وزنی در نظر گرفته می‌شود که میزان اثر گذاری هر تاریخچه را در برآورد کننده‌ها معین می‌سازد. عموماً این وزن در نسل اول برابر یک لحاظ می‌شود. طبیعتاً تعداد چشمه‌های نوترونی از یک نسل به نسل دیگر دچار تغییر می‌شود و از آنجائی که شبیه‌سازی هر نسل به مثابه یک آزمایش بوده و شرایط تمامی آزمایش‌ها باید برابر باشد، لذا با تصحیح وزن چشمه‌ها به صورت رابطه‌ی (۹-۱)، وزن کل چشمه‌ها^{۵۲} در هر نسل ثابت نگاه داشته می‌شود.^{۵۳}

$$w_p^{i+1} = N_p^i \times w_p^i / N_p^{i+1} \quad (1-10)$$

۵۲ تعداد نوترون‌های آغاز کننده در هر نسل ضرب در وزن شان

۵۳ البته در برخی از مراجع علت این امر را جلوگیری نمودن از رشد و یا کاهش بیش از حد جمعیت نوترونی بیان نموده‌اند. اما با توجه به اینکه در روند محاسبات، جمعیت چشمه‌ی نوترونی در هر نسل بر ضریب تکثیر نسل قبل تقسیم و با این کار از رشد و یا کاهش بیش از حد جمعیت نوترونی جلوگیری می‌شود، این دلیل به نظر درست نمی‌آید هر چند این عمل به نوعی باعث این امر می‌شود اما دلیل اصلی این کار به نظر نمی‌رسد.

وزن چشمه نوترونی در نسل i ام W_p^i

وزن چشمه نوترونی در نسل $i + 1$ ام W_p^{i+1}

تعداد چشمه‌های نوترونی در نسل i ام N_p^i

تعداد چشمه‌های نوترونی در نسل $i + 1$ ام N_p^{i+1}

۱۰-۱-۲- نمونه برداری مکان چشمه

در شبیه‌سازی مسائل چشمه ثابت، مکان‌های چشمه از یک تابع توزیع مکانی ثابت نمونه برداری می‌شود. توزیع مکانی چشمه‌ها در این مسائل می‌تواند به صورت‌های مختلفی از جمله توزیع نقطه‌ای، توزیع خطی، توزیع سطحی، توزیع حجمی، توزیع در نواحی مختلف و ... در نظر گرفته شود. اما با توجه به تفاوت ماهیت مسئله بحرانیت با مسئله چشمه ثابت،

توزیع چشمه در هر نسل در مسئله‌ی ویژه‌مقداری یا بحرانیت تغییر می‌کند. در نسل اول مکان‌های چشمه از تابع توزیع مکانی دلخواه و در نسل‌های بعدی مکان‌های چشمه از مکان‌های وقوع شکافت در نسل قبلی بدست می‌آید.

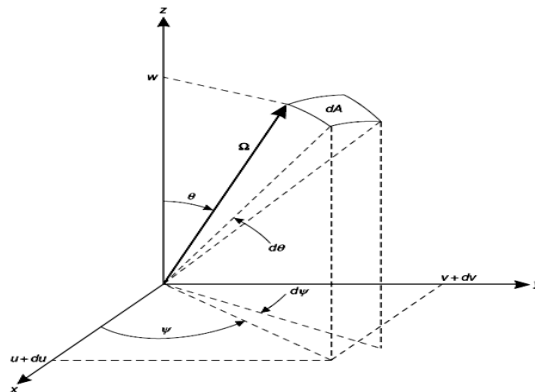
۱۰-۱-۳- نمونه برداری راستای حرکت نوترون

Ω ، یک بردار واحد و نشان دهنده‌ی راستای حرکت نوترون می‌باشد. این بردار در دستگاه دکارتی به صورت رابطه‌ی (۱۰-۱) بیان می‌شود.

$$\Omega = i u + j v + k w = i \sin \theta \cos \psi + j \sin \theta \sin \psi + k \cos \theta \quad (2-10)$$

$$u = \Omega \cdot i = \cos \psi \sqrt{1 - \mu^2} \quad ; \quad v = \Omega \cdot j = \sin \psi \sqrt{1 - \mu^2} \quad ; \quad w = \Omega \cdot k = \mu$$

در این کد از دستگاه مختصات دکارتی برای توصیف حرکت نوترون و همچنین هندسه سیستم استفاده شده است. یکی از دلایل این انتخاب عدم تغییر کسینوس‌های هادی (u, v, w) نسبت به محورهای مختصات دکارتی در حین حرکت نوترون در جهت Ω می‌باشد.



شکل ۴۷: راستای حرکت نوترون

نوترون‌های چشمه شکافت در چارچوب آزمایشگاه به طور همسانگرد گسیل می‌شوند، لذا احتمال اینکه یک نوترون در زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ حول راستای Ω گسیل شود به صورت رابطه‌ی (۳-۱۰) بیان می‌شود.

$$p(\Omega)d\Omega = d\Omega/4\pi = (d\psi/2\pi) (d\mu/2) \quad (3-10)$$

با توجه به رابطه‌ی (۳-۱۰) تابع توزیع احتمال زاویه سمتی ψ و تابع توزیع احتمال کسینوس زاویه قطبی μ به صورت روابط (۴-۱۰) می‌باشند.

$$p(\mu) = 1/2 \quad -1 < \mu < 1 \quad ; \quad p(\psi) = 1/2\pi \quad 0 < \psi < 2\pi \quad (4-10)$$

این دو تابع دارای توزیع یکنواخت بوده و با استفاده از دو عدد تصادفی یکنواخت ξ_i و ξ_{i+1} توزیع شده بین ۰ و ۱ می‌توان از این توابع به صورت رابطه‌ی (۵-۱۰) نمونه‌برداری نمود.

$$\mu_i = 2\xi_{i+1} - 1 \quad ; \quad \psi_i = 2\pi\xi_i \quad (5-10)$$

با استفاده از این مقادیر نمونه برداری شده، راستای حرکت نوترون به صورت زیر مشخص می گردد.

$$u = \cos \psi_i \sqrt{1 - \mu_i^2} \quad ; \quad v = \sin \psi_i \sqrt{1 - \mu_i^2} \quad ; \quad w = \mu_i \quad (6-10)$$

۱۰-۱-۴- نمونه برداری انرژی چشمه نوترون

در مسائل چشمه ثابت نوترون های گسیلی از چشمه می توانند دارای طیف انرژی مختلفی باشند، اما در محاسبات بحرانیت چشمه های نوترونی دارای طیف انرژی شکافت می باشند.

مشاهدات تجربی نشان می دهد که در رخدادهای شکافت در اثر برخورد نوترون فرودی با انرژی چند میلیون الکترون ولت ممکن است یک یا دو نوترون گسیل شده به صورت ناکشسان پراکنده شده باشند نه در اثر فرآیند شکافته شدن نوترون. سطح مقطع این فرآیندها به ترتیب با $\sigma_{n,n'f}$ و $\sigma_{n,2n'f}$ نشان داده می شوند. این مطلب باعث بروز هیچ خطایی در تعداد

نوترون‌های گسیل شده در اثر شکافت نمی‌گردد، زیرا اندازه‌گیری‌ها شامل نوترون‌های ناکشسان نیز می‌باشد. اما این مطلب باعث تغییراتی در طیف انرژی نوترون‌های گسیل شده از رخداد شکافت می‌گردد.

سطح مقطع رخداد شکافت، $\sigma_{n,F}$ ، و تعداد نوترون‌های حاصل از شکافت، ν ، را می‌توان به صورت زیر بیان نمود.

$$\sigma_{n,F} = \sigma_{n,f} + \sigma_{n,n'f} + \sigma_{n,2n'f}$$

$$\nu = \nu' \frac{\sigma_{n,f}}{\sigma_{n,F}} + \frac{\sigma_{n,n'f}}{\sigma_{n,F}} + \frac{2\sigma_{n,2n'f}}{\sigma_{n,F}}$$

در رابطه‌ی فوق $\sigma_{n,f}$ نشان دهنده‌ی سطح مقطع شکافت حقیقی^{۵۴} است که در آن هیچ نوترون ناکشسانی علاوه بر آنهایی که در اثر فرآیند شکافت گسیل می‌شوند، گسیل نمی‌شود. مشاهدات تجربی همچنین نشان داده است که طیف انرژی

نوترونی گسیل شده از واکنش شکافت حقیقی متأثر از نوترون‌های ناکشسان نمی‌شوند. بنابراین انرژی یک نوترون گسیل شده از شکافت با احتمال $\frac{\sigma_{n,n'f}}{v\sigma_{n,F}}$ از طیف واکنش ناکشسان $(n, n'f)$ و با احتمال $\frac{2\sigma_{n,2n'f}}{v\sigma_{n,F}}$ از طیف واکنش ناکشسان $(n, 2n'f)$ باید نمونه‌برداری شود و اگر در فرآیند نمونه‌برداری هیچکدام از این دو توزیع انتخاب نشود، طیف نوترون گسیلی از طیف شکافت حقیقی باید نمونه‌برداری شود.

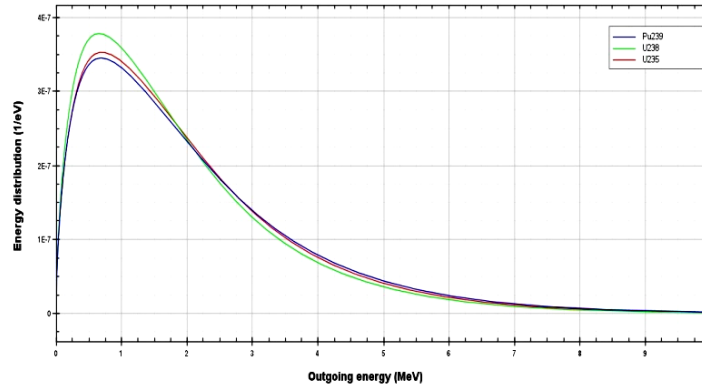
البته در کاربرد سطح مقطع شکافت در اکثر راکتورها از تغییر در طیف گسیل نوترون‌ها در اثر واکنش‌های ناکشسان $\sigma_{n,n'f}$ و $\sigma_{n,2n'f}$ صرف نظر می‌شود، اما در مواردی که شار نوترونی بیش از ۶Mev باشد این واکنش‌ها باید لحاظ شوند. لذا در این کد از تاثیر واکنش‌های ناکشسان در طیف شکافت صرف نظر شده است.

همچنین در بسیاری از کدهای ترابرد طیف انرژی نوترون‌های تولید شده در اثر شکافت، مستقل از انرژی نوترون فرودی در نظر گرفته می‌شود. این فرض در محاسبات راکتورهای هسته‌ای مناسب است زیرا سهم بسیار کمی از نوترون‌های تولید شده در اثر شکافت دارای انرژی بیش از چند میلیون الکترون‌ولت هستند.

در اثر وقوع شکافت حقیقی، دو نوع نوترون آنی و تأخیری گسیل می‌شوند. نوترون‌های آنی شکافت با طیف پیوسته‌ای از انرژی تقریباً به طور همزمان با وقوع شکافت گسیل می‌شوند. این طیف با تابع توزیع $\chi_p(E)$ نشان داده می‌شود. این تابع به گونه‌ای تعریف می‌شود که عبارت $\chi_p(E) dE$ برابر باشد با تعداد نوترون‌های آنی که با انرژی بین E و $E + dE$ در چارچوب آزمایشگاه از واکنش شکافت گسیل می‌شوند. ضمناً این تابع، بهنجار به یک می‌شود، یعنی $\int_0^{\infty} \chi_p(E) dE = 1$.

تابع $\chi_p(E)$ برای چند هسته‌ی شکافت‌پذیر با استفاده از داده‌های تجربی موجود در کتابخانه‌ی ENDF/VII در شکل ۴۸

رسم شده است. این طیف برای عناصر شکافت پذیر مختلف بسیار شبیه به هم بوده و همچنین مشاهده شده که این طیف نسبتاً مستقل از انرژی نوترون فرودی است.



شکل ۴۸: طیف انرژی نوترون های آنی گسیل شده از شکافت های هسته های ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu

(Incident neutron data/ENDF-VII//MT=18,MF=5)

این داده‌های تجربی با روابط تحلیلی مختلفی تقریب زده می‌شود. یک رابطه‌ی تحلیلی نسبتاً مناسب برای داده‌های تجربی اورانیوم ۲۳۵ به صورت رابطه‌ی (۷-۱۰) بیان می‌شود، این رابطه موسوم به طیف وات^{۵۵} می‌باشد.

$$\chi_p(E) = 0.453 e^{-1.036E} \sinh \sqrt{2.29E} \quad (7-10)$$

یک رابطه‌ی تحلیلی دیگر برای این داده‌های تجربی موسوم به طیف ماکسولی^{۵۶} می‌باشد و با رابطه‌ی (۸-۱۰) بیان می‌گردد. البته طیف ماکسولی نسبت به طیف وات، داده‌های تجربی را تا حدی ضعیف‌تر بازتولید می‌کند.

$$\chi_p(E) = 0.770\sqrt{E} e^{-0.776E} \quad (8-10)$$

Watt Spectrum ۵۵

Maxwellian ۵۶

نوترون‌های تأخیری در اثر واپاشی برخی پاره‌های شکافت گسیل می‌شوند، البته در محاسبات بحرانیت یا حالت پایا فرض می‌شود که این نوترون‌ها نیز همراه با نوترون‌های آنی بدون تأخیر گسیل می‌شوند. این نوترون‌ها کسری ناچیز، اما با اهمیت، از نوترون‌های شکافت را تشکیل می‌دهند.

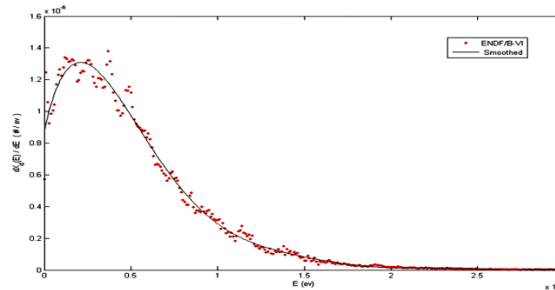
نوترون‌های تأخیری بر اساس نیمه عمر واپاشی مولدهای خود به شش یا هشت گروه تقسیم می‌شوند. هر گروه نوترون تأخیری دارای طیف خاصی از انرژی $(\chi_{di}(E))$ است. با توجه به احتمال حضور نوترون تأخیری در هر یک از گروه‌ها (p_i) ، طیف متوسط نوترون‌های تأخیری با رابطه‌ی زیر بدست می‌آید.

$$\chi_d(E) = \sum_{i=1}^6 p_i \chi_{di}(E) \equiv \sum_{i=1}^6 \frac{\beta_i}{\beta} \chi_{di}(E) \quad \beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i$$

در این رابطه β_i برابر با "کسر نوترون‌های شکافت موجود در گروه تأخیری i ام" می‌باشد.

به عنوان نمونه طیف متوسط انرژی نوترون های تأخیری در اثر شکافت هسته ی اورانیوم ۲۳۵ با استفاده از داده های تجربی موجود در کتابخانه ی ENDF/VII در شکل ۴۹ نشان داده شده است. بنابراین با توجه به مباحث مطرح شده، طیف مؤثر نوترون های گسیل شده از شکافت به صورت زیر قابل بیان می باشد.

$$\chi(E) = (1 - \beta)\chi_p(E) + \beta\chi_d(E)$$



شکل ۴۹: طیف متوسط انرژی نوترون های تأخیری گسیل شده از شکافت ^{235}U
(Incident neutron data/ENDF-VII//MT=18,MF=455)

برای تعیین انرژی چشمه‌ی نوترونی بدون توجه به تأخیری و یا آنی بودن نوترون از تابع توزیع فوق نمونه‌برداری انجام می‌شود. البته در شبیه‌سازی ترابرد نوترون در قالب گروهی، از طیف گروهی شده‌ی شکافت نمونه‌برداری می‌شود. طیف گروهی، یک تابع توزیع گسسته است و بنابراین با توجه به روش نمونه‌برداری از توابع توزیع گسسته می‌توان با استفاده از یک عدد تصادفی یکنواخت در بازه‌ی صفر و یک (ξ) و شرط برقراری رابطه‌ی (۹-۱۰)، گروه انرژی چشمه (g) را مشخص نمود. $\chi_{g'}^j$ طیف شکافت در گروه g' برای ایزوتوپ شکافت‌پذیر k می‌باشد.

$$\sum_{g'=1}^{g-1} \chi_{g'}^k < \xi \leq \sum_{g'=1}^g \chi_{g'}^k \quad (9-10)$$

۱۰-۲- شبیه سازی نقطه‌ی برخورد

بعد از مشخص شدن ویژگی‌های نوترون گسیل شده از چشمه با توجه به خواص سلول، نقطه‌ی برخورد نوترون طبق مباحث مطرح شده در بخش (۶-۵) نمونه‌برداری می‌شود. همانطور که بیان شده است احتمال اینکه یک نوترون واقع در گروه

انرژی g ام در ناحیه‌ی دارای سطح مقطع ماکروسکوپی کل (Σ_{tg}) در بازه ds حول فاصله‌ی s از مکان فعلی خود (r_0) برخورد کند، به صورت رابطه‌ی (۱۰-۱۰) می‌باشد.

$$f(s)ds = e^{-\Sigma_{tg}s} \Sigma_{tg} ds \quad (10-10)$$

بنابراین فاصله تصادفی که نوترون درون ناحیه قبل از برخورد طی می‌کند با نمونه‌برداری از تابع توزیع $f(s)$ به صورت رابطه‌ی (۱۱-۱۰) بدست می‌آید. در این رابطه ξ یک عدد تصادفی یکنواخت در بازه‌ی صفر و یک می‌باشد.

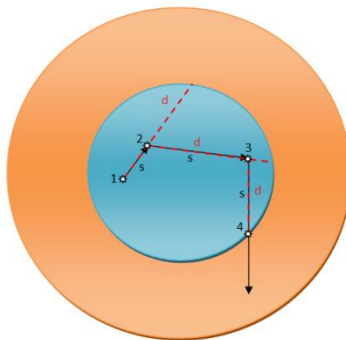
$$S = -\ln(\xi) / \Sigma_{tg} \quad (11-10)$$

اگر فاصله‌ی نمونه‌برداری شده تا نقطه‌ی برخورد (S) از فاصله‌ی جهت‌دار نوترون تا مرز ناحیه جاری (d) کوچک‌تر باشد (مانند گام تصادفی ۱-۲ و ۳-۲ در شکل ۵۰) آنگاه مکان نوترون به نقطه‌ی برخورد منتقل شده و فیزیک برخورد در نقطه‌ی

برخورد شبیه سازی می شود. بردار مکان جدید نوترونی که از مکان r_0 در راستای Ω مسافت S را طی کرده با رابطه ی (۱۰-۱) بدست می آید.

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + S\Omega ; x = x_0 + Su , y = y_0 + Sv , z = z_0 + Sw \quad (10-12)$$

اما اگر S از فاصله ی جهت دار نوترون تا مرز ناحیه جاری بزرگ تر باشد (مانند گام تصادفی ۴-۳ در شکل ۵۰، البته نقطه ی ۴ در حالت اصلاح شده نشان داده شده است) آنگاه مکان نوترون به روی مرز انتقال داده می شود ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + d\Omega$) اما در این نقطه، فیزیک برخورد مدل نمی شود و شماره ی سلول به شماره ی سلولی که نوترون وارد آن خواهد شد تغییر می کند و سپس با استفاده از سطح مقطع سلول جدید، میزان فاصله طی شده در سلول جدید اصلاح می شود.



شکل ۵۰: نمونه برداری نقطه‌ی برخورد و ترابرد نوترون

۱۰-۳- شبیه‌سازی فیزیک برخورد

بعد از انتقال نوترون به نقطه‌ی برخورد، با توجه به سطح مقاطع مواد موجود در نقطه‌ی برخورد، نوع اندرکنش نوترون نمونه برداری می‌شود. در محاسبات بحرانیّت لزومی به شبیه‌سازی تمامی اندرکنش‌ها به طور مجزا وجود ندارد.

اندرکنش جذب به واکنشی اطلاق می شود که نوترون فرودی نابود شده و ترابرد محصول واکنش در نسل جاری بی اهمیت باشد. در شبیه سازی محاسبات بحرانی، اندرکنش شکافت به منزله جذب عمل می کند و در صورت وقوع شکافت، صرفاً اطلاعات نوترون های حاصل از شکافت برای ترابرد در نسل بعد ذخیره می شود، بنابراین می توان شکافت را به صورت یک جزئی از واکنش جذب شبیه سازی نمود. همچنین از آنجایی که کشسان و یا ناکشسان بودن پراکندگی تأثیری بر ماهیت نوترون خروجی ندارد، لذا می توان این دو نوع پراکندگی را در قالب یک سطح مقطع شبیه سازی نمود.

۱۰-۳-۱- شبیه سازی اندرکنش شکافت

اگر در نقطه ی برخورد، محیط شکافت پذیر باشد، اندرکنش شکافت با احتمال Σ_{fg}/Σ_{tg} رخ می دهد و تاریخچه نوترون در نسل جاری خاتمه یافته و تعداد نوترون های حاصل از این شکافت به عنوان بخشی از چشمه های نوترونی نسل بعد محاسبه و ذخیره می شوند.

تعداد نوترون‌های گسیل شده از شکافت، یک عدد صحیح و از طرفی تصادفی است.

در کد با استفاده از رابطه زیر می‌توان بدون ایجاد خطا، تعداد نوترون‌های حاصل از شکافت را بصورت صحیح طبق روش Binary نمونه‌برداری نمود.

$$n = \lceil \bar{v}_g/K + \xi \rceil$$

البته در محاسبات بحرانیت برای کنترل جمعیت نوترونی، پارامتر \bar{v}_g بصورت (\bar{v}_g/K) بکار می‌رود. در این رابطه ξ یک عدد تصادفی بین صفر و یک می‌باشد. این عدد تصادفی باعث می‌شود تا بدون تغییر در تعداد متوسط نوترون‌های حاصل از شکافت، تعداد نوترون‌های شکافت در هر برخورد به یک عدد صحیح گرد شود.

اما در عمل برای کاهش واریانس و پخش بهتر چشمه‌های شکافت، واکنش شکافت به طور مجزا نمونه‌برداری نمی‌شود، بلکه در قالب واکنش جذب نمونه‌برداری می‌شود و صرفاً برای تولید چشمه‌های شکافت نسل بعد، در هر نقطه برخورد طبق

رابطه‌ی (۱۰-۱۳) تعداد متوسط نوترون‌های حاصل از شکافت نمونه‌برداری و ذخیره می‌شوند.

$$n_c = \left[\frac{w\bar{v}_g \Sigma_{fg}}{K \Sigma_t} + \xi \right] \quad n_i = \sum n_c \quad (10-13)$$

در این رابطه n_c برابر با تعداد نوترون‌های شکافت تولید شده در برخورد c ام تاریخچه i ام و n_i برابر با کل نوترون‌های شکافت تولید شده در طول حیات تاریخچه i ام می‌باشد. در این رابطه K ویژه مقدار نسل قبلی (برای نسل اول یک حدس اولیه استفاده می‌شود) می‌باشد.

۱۰-۳-۲- شبیه‌سازی اندرکنش جذب

در این کد شبیه‌سازی اندرکنش جذب (شامل شکافت) به دو روش امکان‌پذیر می‌باشد. در هر دو روش مقدار متوسط جذب به درستی شبیه‌سازی شده و هیچ بایاس یا خطایی در نتایج ایجاد نمی‌گردد.

۱۰-۳-۲-۱- جذب صریح^{۵۷}

در شبیه‌سازی جذب به صورت صریح، فیزیک واقعی جذب شبیه‌سازی می‌شود و در صورت وقوع اندرکنش جذب، نوترون نابود می‌شود. در این روش نوع اندرکنش (جذب یا پراکندگی) نوترون با توجه به تابع توزیع احتمال گسسته بدست آمده از سطح مقطع جذب و پراکندگی شبیه‌سازی می‌گردد. در واقع این کار با استفاده از روش نمونه‌برداری از توابع توزیع گسسته به صورت زیر انجام می‌شود:

$$\xi \leq \frac{\Sigma_{ag}}{\Sigma_{tg}} \rightarrow \text{اندرکنش جذب} \quad ; \quad \frac{\Sigma_{ag}}{\Sigma_{tg}} < \xi \leq 1 \rightarrow \text{اندرکنش پراکندگی} \quad (10-14)$$

در این رابطه ξ یک عدد تصادفی بین صفر و یک می‌باشد، اگر نوع واکنش جذب باشد، تاریخچه‌ی نوترون پایان می‌پذیرد و اگر پراکندگی رخ دهد، راستای حرکت و گروه انرژی جدید نوترون از توابع توزیع متناظرشان نمونه‌برداری می‌شوند.

۱۰-۳-۲-۲- جذب ضمنی^{۵۸}

در این روش شبیه سازی در نقطه برخورد، وزن نوترون به صورت رابطه‌ی (۱۰-۱۵) کاهش یافته و نوترون پراکنده می‌شود. به عبارتی دیگر در این روش برای تعیین نوع اندرکنش، نمونه برداری صورت نمی‌پذیرد بلکه نوترون قطعاً با وزنی کاهش یافته پراکنده می‌شود.

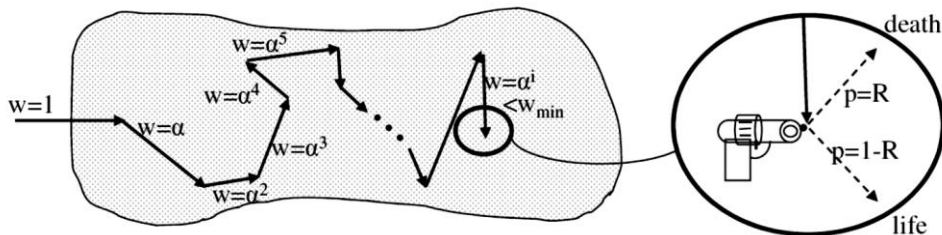
$$W'_n = \left(1 - \frac{\sigma_a}{\sigma_T}\right) W_n \quad (10-15)$$

از آنجائی که در این روش شبیه سازی، نوترون در طول یک تاریخچه از طریق جذب نابود نمی‌شود بلکه صرفاً وزنش کاهش می‌یابد، لذا زمان زیادی برای دنبال کردن نوترون‌هایی با وزن کم صرف می‌شود که در اندازه گیری اثر کمی دارند. استفاده

از رولت روسی^{۵۹} به عنوان یک روش کاهش واریانس برای برطرف نمودن این مشکل می‌باشد. در این روش هرگاه وزن نوترون کمتر از یک مقدار آستانه یا وزن قطع (w_{\min}) گردد، نوترون به اصطلاح وارد بازی رولت روسی به صورت زیر می‌شود:

- یک مقدار بین صفر و یک ($0 < R < 1$) برای پارامتر رولت روسی (R) اختیار می‌شود. (مقدار $R = 0.5$ بسیار مناسب است)
- یک عدد تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه صفر و یک (ξ) تولید می‌شود.
- اگر $\xi < R$ باشد، نوترون نابود می‌شود ($w' = 0$).
- در غیر این صورت، وزن نوترون به مقدار ($w' = \frac{w}{1-R}$) افزایش یافته و نوترون به حیات خود ادامه می‌دهد.

در حالت ضمنی دو کمیت وزن قطع و R توسط کاربر تعیین می شود.



شکل ۵۱: استفاده از روش رولت روسی در شبیه سازی ضمنی جذب

می توان اثبات نمود که این نوع نمونه برداری چنانچه تعداد زیادی (N) از نوترون ها با وزن w وارد این بازی شوند، بی طرفانه می باشد. مقدار وزن مورد انتظار بعد از بازی رولت به صورت زیر می باشد. مشاهده می شود که این مقدار مشابه مقدار بدون استفاده از رولت روسی می باشد.

$$Nw = N \times R \times 0 + N \times (1 - R) \times \frac{w}{1 - R} = Nw$$

۱۰-۳-۳- شبیه‌سازی اندرکنش پراکندگی

در شبیه‌سازی ترابرد گروهی نوترون، برای اندرکنش پراکندگی باید گروه انرژی و راستای نوترون خروجی تعیین شود. برای این منظور از سطح مقاطع دیفرانسیلی پراکندگی استفاده می‌شود. در هر اندرکنش پراکندگی با توجه به گروه انرژی نوترون فرودی و سطح مقاطع پراکندگی گروه به گروه، گروه انرژی نوترون خروجی نمونه‌برداری شده و با توجه به تابع توزیع زاویه‌ای مربوطه، انحراف راستای نوترون خروجی از راستای فرودی نمونه‌برداری می‌شود. سپس راستای نوترون خروجی با توجه به راستای نوترون فرودی و همچنین میزان انحراف آن مشخص می‌شود. با تعیین گروه انرژی و راستای نوترون خروجی ترابرد ذره در محیط ادامه می‌یابد.

از آنجایی که پراکندگی ناهمسانگرد به وسیله ضرایب لژاندر بیان می‌شود، استفاده مستقیم از این ضرایب در کدهای مونت کارلو به دلیل پیچیدگی در نمونه‌برداری و همچنین امکان منفی شدن تابع توزیع احتمال دشوار می‌باشد. از این رو تبدیل آنها به توابع توزیع مناسب برای شبیه‌سازی الزامی است.

۱۰-۳-۳-۱- نمونه‌برداری گروه انرژی نوترون خروجی

در واکنش پراکندگی، نوترون خروجی (در این کد با توجه به نحوه‌ی تعریف سطح مقطع پراکندگی، تعداد نوترون‌های خارج شده از اندرکنش پراکندگی همواره یک نوترون می‌باشد و اثر تعداد در مقدار سطح مقطع لحاظ شده است) از اندرکنش می‌تواند انرژی و جهتی متفاوت با نوترون فرودی داشته باشد که با توجه به سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی تعیین می‌شود.

همانطور که در بخش ۷ اشاره شد احتمال پراکندگی نوترونی از گروه g به گروه g' با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$P_1^{g \rightarrow g'} = \sigma_{S,0}^{g \rightarrow g'} / \sum_{k'=1}^G \sigma_{S,0}^{g \rightarrow k'} \quad (16-10)$$

لذا با استفاده از یک عدد تصادفی بین صفر و یک و با شرط برقراری رابطه‌ی زیر، گروهی که نوترون به آن پراکنده خواهد شد (k) نمونه‌برداری می‌شود.

$$\sum_{g'=1}^{k-1} \frac{\sigma_{S,0}^{g \rightarrow g'}}{\sum_{k'=1}^G \sigma_{S,0}^{g \rightarrow k'}} < \xi \leq \sum_{g'=1}^k \frac{\sigma_{S,0}^{g \rightarrow g'}}{\sum_{k'=1}^G \sigma_{S,0}^{g \rightarrow k'}} \quad (17-10)$$

۱۰-۳-۲- نمونه‌برداری کسینوس زاویه‌ی پراکندگی

در این مرحله با توجه به مشخص شدن گروه پراکنده شده نوترون، تابع توزیع احتمال $P_2^{g \rightarrow g'}(\mu_c)$ به صورت رابطه (۱۰-۱۸) تعیین می‌گردد.

$$P_2^{g \rightarrow g'}(\mu_c) = \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{2} \frac{\sigma_{S,l}^{g \rightarrow g'}}{\sigma_{S,0}^{g \rightarrow g'}} P_l(\mu_c) \quad (10-18)$$

با استفاده از تابع توزیع $P_2^{g \rightarrow g'}(\mu_c)$ کسینوس زاویه پراکندگی نمونه برداری می شود. نمونه برداری مستقیم از این تابع توزیع پیوسته در مواردی که مرتبه ی بسط بالا باشد کار دشواری است. لذا برای سهولت در نمونه برداری کسینوس زاویه پراکندگی، در این موارد تابع توزیع به شکل مناسبی تبدیل می شود که در جای خود به آن اشاره می شود.

بعد از مشخص شدن گروه انرژی نوترون پراکنده شده، با توجه به مرتبه ی بیان ناهمسانگردی، کسینوس زاویه پراکندگی نوترون پراکنده شده نمونه برداری می شود. سه حالت پراکندگی همسانگرد (P_0)، ناهمسانگرد خطی (P_1) و ناهمسانگردی مراتب بالاتر (P_n) به صورت زیر شبیه سازی می شوند:

- پراکندگی همسانگرد

در حالتی که سطح مقطع پراکندگی صرفاً شامل مرتبه‌ی بسط صفر باشد، پراکندگی در چارچوب آزمایشگاه همسانگرد P_0 در نظر گرفته شده و به طور مستقیم همانند چشمه شکافت، راستای حرکت نوترون خروجی به طور همسانگرد نمونه برداری می‌شود و نیازی به نمونه برداری کسینوس زاویه‌ی پراکندگی به طور جداگانه نمی‌باشد چرا که در این حالت راستای حرکت نوترون پراکنده شده مستقل از راستای نوترون فرودی می‌باشد.

$$\mu'_i = 2\xi_i - 1 \quad ; \quad \psi'_i = 2\pi\xi_{i+1}$$

$$u' = \sqrt{1 - \mu_i'^2} \cos\psi'_i$$

$$v' = \sqrt{1 - \mu_i'^2} \sin\psi'_i$$

(۱۹-۱۰)

$$w' = \mu'_i$$

در این رابطه ξ_i و ξ_{i+1} دو عدد تصادفی یکنواخت توزیع شده بین صفر و یک می‌باشند.

- پراکندگی ناهمسانگرد خطی

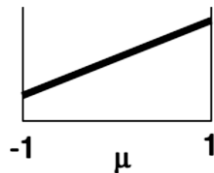
اگر سطح مقطع پراکندگی با مرتبه‌ی ناهمسانگردی P_1 تقریب زده شده باشد، رابطه‌ی (۱۰-۱۹) به صورت تابع توزیع خطی زیر تبدیل می‌شود. در این رابطه $\bar{\mu}$ برابر با مقدار متوسط کسینوس زاویه پراکندگی می‌باشد.

$$P_2^{g \rightarrow g'}(\mu) \cong \frac{1}{2} + \frac{3}{2} \bar{\mu} \mu \quad ; \quad \bar{\mu} = \frac{\sigma_{1,g \rightarrow g'}}{\sigma_{0,g \rightarrow g'}}$$

نمونه‌برداری کسینوس زاویه پراکندگی از تابع توزیع خطی فوق به صورت زیر انجام می‌شود:

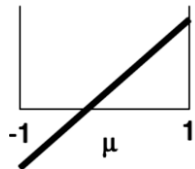
- به ازای مقادیر $|\bar{\mu}| \leq \frac{1}{3}$ ، تابع توزیع $P_2^{g \rightarrow g'}(\mu)$ به ازای تمامی مقادیر μ مثبت می‌باشد لذا بدون مشکل، کسینوس زاویه پراکندگی از رابطه (۹-۲۱) بدست می‌آید. در این رابطه ξ یک عدد تصادفی در بازه‌ی -۱ تا +۱ می‌باشد.

$$\mu = \frac{(\sqrt{1+6\xi\bar{\mu}+(3\bar{\mu})^2}-1)}{3\bar{\mu}} \quad (۱۰-۲۰)$$



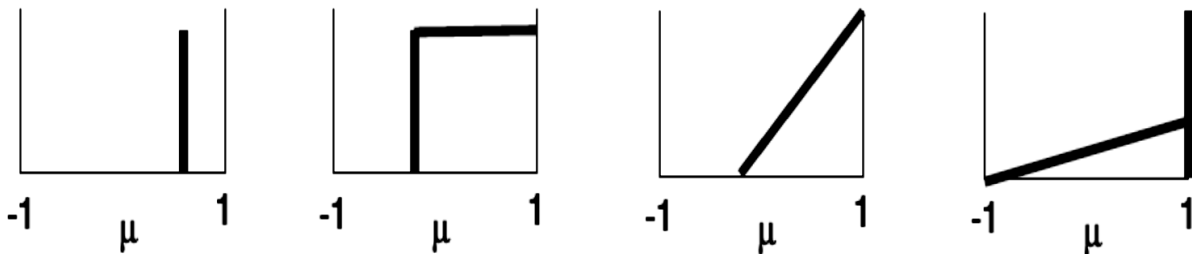
شکل ۵۲: نمونه‌ای از تابع توزیع زاویه‌ی که به ازای تمامی مقادیر μ مثبت است.

به ازای مقادیر $|\bar{\mu}| > \frac{1}{3}$ ، $P_2^{g \rightarrow g'}(\mu)$ به علت وجود خطای برشی در بسط، به ازای مقادیری، μ منفی می‌شود که این امر برای تابع توزیع نامطلوب می‌باشد.



شکل ۵۳: نمونه‌ای از تابع توزیع زاویه‌ی که به ازای برخی مقادیر μ منفی است.

یک راه حل این مشکل جایگزینی این تابع توزیع با تابع توزیع دیگری است که همواره مثبت باشد و همچنین ممان صفر (σ_{s0} سطح مقطع پراکندگی) و ممان یکم ($\sigma_{s1} = \sigma_{s0} \bar{\mu}$) سطح مقطع پراکندگی فیزیکی را همانند تابع توزیع اصلی به درستی حفظ کند. توابع نشان داده شده در شکل ۵۴ می‌توانند شرایط مذکور را ارضا کنند.



شکل ۵۴: نمونه‌هایی از تابع توزیع جایگزین برای تابع توزیع پراکندگی

در شکل ۵۴، دومین تابع از سمت چپ (هیستوگرام تک پله‌ای) به عنوان تابع توزیع جایگزین دارای خواص زیر می‌باشد.

$$g(\mu) = \begin{cases} \frac{1}{2 + 2\bar{\mu}} & ; \quad -1 \leq \mu \leq 2\bar{\mu} + 1; \quad \bar{\mu} < -\frac{1}{3} \\ 0 & ; \quad 2\bar{\mu} + 1 < \mu \leq 1; \quad \bar{\mu} < -\frac{1}{3} \\ \frac{1}{2 - 2\bar{\mu}} & ; \quad 2\bar{\mu} - 1 \leq \mu \leq 1; \quad \bar{\mu} > \frac{1}{3} \\ 0 & ; \quad -1 \leq \mu < 2\bar{\mu} - 1; \quad \bar{\mu} > \frac{1}{3} \end{cases}$$

با استفاده از یک عدد تصادفی یکنواخت (ξ) در بازه -1 تا $+1$ کسینوس زاویه پراکندگی از رابطه‌ی $(21-10)$ نمونه‌برداری می‌شود.

$$\mu = \xi(1 - |\bar{\mu}|) + \bar{\mu} \quad (21-10)$$

- ناهمسانگردی مرتبه‌ی بالاتر

در مواردی که ناهمسانگردی با مراتب بالاتر از ۱ (حداکثر ۱۴) بیان شده باشد، باید تابع توزیع $P_2^{g \rightarrow g'}(\mu_c)$ را تشکیل داده و با استفاده از آن کسینوس زاویه پراکندگی نمونه‌برداری شود. اما نمونه‌برداری مستقیم از چنین تابع توزیع پیوسته‌ای کار دشواری است، لذا برای سهولت در نمونه‌برداری کسینوس زاویه پراکندگی، در این کد این تابع توزیع به شکل تابع توزیع هیستوگرامی با بازه‌های هم احتمال تبدیل می‌شود.

در این روش تابع توزیع با یک تابع توزیع هیستوگرامی تقریب زده می‌شود. برای این کار بازه مقادیر ممکن μ ، $[-1,+1]$ ، به N زیربازه هم احتمال تقسیم می‌شود.

$$\int_{-1}^1 P_2^{g \rightarrow g'}(\mu) d\mu = 1$$

$$\frac{k}{N} = \int_{-1}^{\mu_k} P_2^{g \rightarrow g'}(\mu) d\mu \quad k = 1, 2, 3, \dots, N$$

و در هر زیربازه یک تابع توزیع ثابت برابر با $\frac{1}{N(\mu_k - \mu_{k-1})}$ فرض می‌شود. بنابراین با استفاده از یک عدد تصادفی یکنواخت ξ بین صفر و یک، مقدار μ به سادگی از رابطه (۱۰-۲۲) از تابع توزیع هیستوگرامی نمونه‌برداری می‌شود.

$$\frac{i}{N} \leq \xi < \frac{i+1}{N} \Rightarrow \frac{i}{N} + \int_{\mu_i}^{\mu} \frac{d\mu}{N(\mu_{i+1} - \mu_i)} = \xi \Rightarrow \mu = \mu_i + (N\xi - i)(\mu_{i+1} - \mu_i) \quad (22-10)$$

بنابراین در این روش، تنها لازم است یک بار قبل از شروع فرآیند شبیه‌سازی، مقادیر مربوط به محدوده بازه‌ها محاسبه و در حین شبیه‌سازی استفاده شوند.

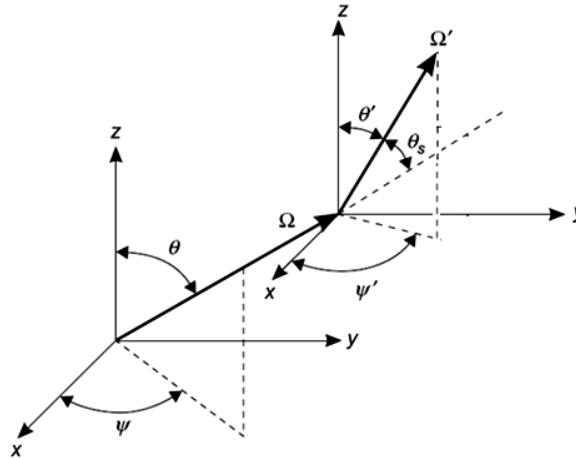
این روش تقریب خوبی از نمایش نواحی با احتمال زیاد می‌باشد، اما تقریب ضعیفی از نواحی کم احتمال است. به عنوان مثال این روش در پراکندگی قویاً رو به جلو، به طور نسبتاً صحیحی پراکندگی رو به جلو را نشان می‌دهد اما ممکن است

تمامی زوایای پراکندگی رو به عقب را تنها با یک یا چند زیربازه اندک نمایش دهد. این روش از سرعت بالایی در نمونه برداری برخوردار است اما ممکن است جزئیات مربوط به تابع توزیع پراکندگی را همانند حالت ذکر شده به خوبی شبیه سازی نکند. البته در استفاده از این تبدیلات نیز باید با دقت رفتار نمود زیرا ممکن است به علت محدود بودن مرتبه بسط، تابع توزیع در کل بازه مثبت نباشد. لذا قبل از استفاده از این تبدیلات باید به نوعی مقادیر منفی را حذف نمود، در غیر این صورت جوابهایی با دقت کم بدست خواهد آمد. در کد اگر توزیع زاویه‌ای به ازای پراکندگی از یک گروه به گروه خاصی دارای مقدار منفی باشد، بسط تابع توزیع تا مرتبه‌ی یک در نظر گرفته شده و زاویه‌ی پراکندگی از بسط مرتبه‌ی یک نمونه برداری می‌شود.

۱۰-۳-۳-۳- تعین راستای حرکت نوترون پراکنده شده

در واکنش پراکندگی، نوترون فرودی با راستای اولیه‌ی (Ω) وارد واکنش شده و یک نوترون خروجی با راستای (Ω') خارج می‌شود. در این مرحله باید کسینوس‌های هادی (u', v', w') راستای حرکت نوترون خروجی Ω' برای ادامه ترابرد مشخص شود. راستای حرکت نوترون ورودی به و خروجی از پراکندگی در شکل ۵۵ نشان داده شده است.

در شکل θ و ψ زوایای قطبی و سمتی نوترون قبل از پراکندگی، θ' و ψ' زوایای قطبی و سمتی نوترون خروجی و همچنین θ_s زاویه بین راستای حرکت نوترون ورودی و خروجی می‌باشند که در مرحله‌ی قبل نمونه‌برداری شده است. نوترون خروجی نسبت به بردار Ω تحت زاویه θ_s پراکنده می‌شود، ضمناً زاویه‌ی سمتی ψ_s نوترون خروجی، زاویه بین تصویر بردار Ω' در صفحه عمود بر بردار Ω و یک محور دلخواه در آن صفحه می‌باشد. این زاویه با توجه به همسانگردی زاویه سمتی به طور یکنواخت بین 0 و 2π توزیع شده است.



شکل ۵۵: راستای حرکت نوترون ورودی به و خروجی از اندرکنش پراکندگی

راستای جدید حرکت نوترون با استفاده از روابط زیر محاسبه می‌شود:

$$u' = u \mu_s + \sqrt{1 - \mu_s^2} (w u \cos \psi_s - v \sin \psi_s) / \sqrt{1 - w^2}$$

$$v' = v \mu_s + \sqrt{1 - \mu_s^2} (w v \cos \psi_s + u \sin \psi_s) / \sqrt{1 - w^2} \quad (23-10)$$

$$w' = w \mu_s - \sqrt{1 - w^2} \sqrt{1 - \mu_s^2} \cos \psi_s$$

در رابطه (23-10) داریم:

$$\sin \theta = \sqrt{1 - w^2} ; u = \sin \theta \cos \psi ; v = \sin \theta \sin \psi \quad (24-10)$$

$$\mu_s = \cos \theta_s$$

نتایج بدست آمده در اکثر موارد برای محاسبه کسینوس‌های هادی کافی است. با این حال در مواردی که بردار جهت، Ω ، تقریباً موازی محور zها باشد ($w \approx 1$) عبارت $1/\sqrt{1 - w^2}$ ظاهر شده در روابط (23-10) خیلی بزرگ می‌شود و باعث

ایجاد خطاهای عددی می‌گردد. لذا در مواردی که $w > 0.9$ باشد از روابط هم ارز به صورت روابط (۱۰-۲۵) استفاده می‌شود:

$$u' = u \mu_s + \sqrt{1 - \mu_s^2} (v u \cos \psi_s + w \sin \psi_s) / \sqrt{1 - v^2}$$

$$v' = v \mu_s - \sqrt{1 - v^2} \sqrt{1 - \mu_s^2} \cos \psi_s \quad (۱۰-۲۵)$$

$$w' = w \mu_s + \sqrt{1 - \mu_s^2} (w v \cos \psi_s - u \sin \psi_s) / \sqrt{1 - v^2}$$

با توجه به مشخص بودن (u, v, w) و μ_s ، برای محاسبه راستای خروج نوترون تنها نیاز به نمونه‌برداری مقادیر $\sin \psi_s$ و $\cos \psi_s$ که با توجه به توزیع یکنواخت زاویه سمتی نمونه‌برداری می‌شود. [۱]

۱۱- برآورد کننده‌های محاسبات بحرانیت

در شبیه‌سازی ترابرد نوترون ضمن پیگیری حرکات تصادفی نوترون‌ها در درون سیستم، باید اطلاعات مورد نظرمان را از شبیه‌سازی استخراج کنیم، که این کار توسط شمارنده‌های^{۶۰} مونت کارلو انجام می‌شود. در هر تاریخچه، رویدادهای مربوط به نوترون همانند برخوردها، اندرکنش‌ها، عبور از مرزها و ... با استفاده از شمارشگرهایی قابل اندازه‌گیری می‌باشند. معمولاً در شبیه‌سازی شمارشگر برای هر نوترون به صورت مستقل عمل می‌کند و در انتهای شبیه‌سازی مقدار متوسط کمیت مورد نظر به ازای یک نوترون، با تقسیم نمودن مقدار نتایج به تعداد کل نوترون‌های دنبال شده، محاسبه می‌شود. به شمارشگرها می‌توان به عنوان برآورد کننده‌های آماری رفتار نوترون‌ها که با نمونه‌برداری از تاریخچه‌هایی از مسئله فیزیکی بدست می‌آیند، نگریست. برآورد کننده‌ها مانند هر کمیت آماری دارای انحراف معیار می‌باشند و لذا انحراف معیار نیز باید برآورد

Tally ۶۰

شود تا بتوان نتیجه را در قالبی مناسب کمیات آماری بیان نمود. در این کد ضریب تکثیر موثر سیستم با استفاده از سه برآورد کنندهی مختلف بدست می آید و همچنین این کد قادر به محاسبه ی شار متوسط حجمی و توان سیستم با استفاده از مش تالی می باشد. در بخش های بعدی هر کدام از این کمیت ها و نحوه ی شمارش آنها تشریح می شود.

۱۱-۱- برآورد کننده ی برخورد^{۶۱} ضریب تکثیر موثر

ضریب تکثیر مؤثر سیستم با استفاده از برآورد کننده ی برخورد در هر نقطه ی برخورد در طول یک نسل با رابطه ی (۱۱)- (۱) تخمین زده می شود.

$$K_{eff}^C = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{c=1}^{c_i} W_{i,c} \frac{\nu_g \sum_{fg}}{\sum_{Tg}}}{N} \quad (1-11)$$

کمیت‌های بکارگیری شده در رابطه‌ی (۱-۱۱) به شرح زیر می‌باشند.

K_{eff}^C : تعداد متوسط کل نوترون‌های تولید شده در اثر شکافت در یک نسل؛

N : تعداد کل نوترون‌ها در یک نسل؛

C_i : تعداد کل برخوردهای تاریخچه‌ی i ام؛

$W_{i,c}$: وزن نوترون i ام بین دو برخورد C و $C - 1$ ؛

\sum_{fg} : سطح مقطع ماکروسکوپی شکافت در نقطه‌ی برخورد در گروه انرژی نوترون i ام؛

Σ_{Tg} : سطح مقطع ماکروسکوپی کل در نقطه‌ی برخورد در گروه انرژی i ام.

v_g : تعداد متوسط نوترون‌های حاصل از شکافت ناشی از نوترونی با گروه انرژی g

۱۱-۲- برآورد کننده‌ی جذب 62 ضریب تکثیر موثر

برآورد کننده جذب ضریب تکثیر مؤثر، در هر نسل هنگامی که یک نوترون با یک هسته شکافت‌پذیر واکنش می‌دهد شمارش می‌شود. این برآورد کننده در دو حالت جذب آنالوگ و ضمنی متفاوت می‌باشد.

این برآورد کننده برای حالتی که جذب به صورت آنالوگ در نظر گرفته می شود با رابطه ی (۲-۱۱) بیان می گردد. در واقع اگر در نقطه ی برخورد، هسته ی واکنش دهنده شکافت پذیر بوده و در نمونه برداری نوع واکنش، جذب بدست بیاید آنگاه این برآورد کننده شمارش می شود.

$$K_{eff}^A = \frac{\sum_i W_i \left[\frac{\nu_g \Sigma_{fg}}{\Sigma_{\gamma g} + \Sigma_{fg}} \right]}{N} \quad (2-11)$$

K_{eff}^A : تعداد متوسط کل نوترون های تولید شده در اثر شکافت در یک نسل؛

i : شمارشگر جذب های آنالوگ در یک نسل؛

N : تعداد کل نوترون ها در یک نسل؛

W_i : وزن نوترون قبل از جذب آنالوگ؛

Σ_{fg} : سطح مقطع ماکروسکوپی شکافت در گروه انرژی نوترون g ؛

ν_g : تعداد متوسط نوترون‌های حاصل از شکافت ناشی از نوترونی با گروه انرژی g

$\Sigma_{\gamma g}$: سطح مقطع ماکروسکوپی جذب پرتوزا در گروه انرژی نوترون g ؛

Σ_{ag} : سطح مقطع ماکروسکوپی جذب در گروه انرژی نوترون g ($\Sigma_{fg} + \Sigma_{\gamma g} = \Sigma_{ag}$).

در جذب آنالوگ وزن نوترون قبل و بعد از برخورد یکسان می‌باشد و از آنجائی که جذب آنالوگ در محاسبات بحرانی شامل شکافت است، لذا فراوانی جذب آنالوگ در هر برخورد به صورت $(\Sigma_{fg} + \Sigma_{\gamma g}) / \Sigma_{Tg}$ می‌باشد.

این برآورد کننده برای حالتی که جذب به صورت ضمنی در نظر گرفته می شود با رابطه‌ی (۳-۱۱) بیان می گردد. در واقع در هر نقطه‌ی برخورد، این برآورد کننده باید شمارش شود.

$$K_{eff}^A = \frac{\sum_i W'_i \left[\frac{\nu_g \Sigma_{fg}}{\Sigma_{\gamma g} + \Sigma_{fg}} \right]}{N} \quad (3-11)$$

در رابطه فوق داریم:

i روی تمامی برخوردهایی که شکافت محتمل باشد جمع بسته می شود؛

W'_i برابر با وزن جذب شده در جذب ضمنی می باشد. $(W'_i = w_i \frac{\Sigma_{\gamma} + \Sigma_f}{\Sigma_{Tk}})$

۱۱-۳- برآورد کننده‌ی طول پیمایش^{۶۳} ضریب تکثیر موثر

برآورد کننده طول پیمایش در هر نسل تا زمانی که نوترون مسافتی را درون ناحیه حاوی ماده شکافت پذیر می پیماید، به صورت رابطه‌ی (۱۱-۴) شمارش می شود.

$$K_{eff}^{TL} = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{c=1}^{c_i} W_{i,c} S_{i,c} \nu_g \Sigma_{fg}}{N} \quad (۱۱-۴)$$

در این رابطه داریم:

N : تعداد کل نوترون‌ها در یک نسل؛

Track Length Estimator^{۶۳}

C_i : تعداد کل رخدادها اعم از برخورد و یا عبور از مرز برای تاریخچه‌ی i ام؛ $W_{i,c}$: وزن نوترون i ام بین دو رخداد C و $C - 1$

$S_{i,c}$: مسافت پیموده شده توسط نوترون i ام بین دو رخداد C و $C - 1$ ؛

Σ_{fg} : سطح مقطع شکافت ناحیه در گروه انرژی نوترون i ام می‌باشد.

این برآورد کننده نشان دهنده‌ی تعداد چشم‌داشتی نوترون‌های شکافت تولید شده به موازات پیمایش مسافت S توسط نوترون می‌باشد. برآورد کننده طول پیمایش برای نواحی نازکی از سوخت (از نظر مسافت آزاد میانگین) و سامانه‌های سریع دارای نتایج بهتری می‌باشد چرا که به علت تغییرات شدید در سطح مقطع‌ها به علت وجود رزونانس‌ها ممکن است دو برآورد کننده‌ی دیگر دارای واریانس بزرگ‌تری شوند.

۱۱-۴- برآورد مقدار متوسط و انحراف معیار ضریب تکثیر

همانطور که قبل از این اشاره شده است، به نسل‌های اولیه‌ای که قبل از رسیدن سیستم به مد پایه شبیه‌سازی می‌شوند اصطلاحاً نسل‌های غیر فعال و به نسل‌های بعد از آن اصطلاحاً نسل‌های فعال می‌گویند. از نسل‌های غیر فعال برای برآورد نهایی ضریب تکثیر و دیگر کمیت‌ها استفاده نمی‌شود.

در هر نسل سه برآورد کننده‌ی برخورد، جذب و طول پیمایش به همراه میانگین ساده و وزن شده آنها محاسبه می‌شوند. میانگین ساده این برآورد کننده‌ها به صورت رابطه‌ی (۱۱-۵) برآورد می‌شود.

$$K_i^{sc} = (K_i^A + K_i^C + K_i^{Tl})/3 \quad (۱۱-۵)$$

و میانگین وزن شده واریانسی این برآورد کننده‌ها به صورت رابطه‌ی (۱۱-۶) برآورد می‌شود.

$$K_i^{CW} = \frac{W^A \times K_i^A + W^C \times K_i^C + W^T \times K_i^{Tl}}{W^A + W^C + W^T} \quad (6-11)$$

در میانگین گیری وزن شده واریانسی، وزن مربوط به هر تخمین گر با توجه به کمینه کردن واریانس ضریب تکثیر موثر ترکیبی محاسبه می شود. جزئیات مربوط به نحوه محاسبه میانگین و انحراف معیار با این روش میانگین گیری در بخش ۸-۸۸ آورده شده است.

بعد از پایان شبیه سازی تمامی نسل ها، مقدار ضریب تکثیر سیستم با متوسط گیری از مقادیر ضریب تکثیر نسل های فعال به صورت رابطه ی (۷-۱۱) برآورد می شود.

$$K = \frac{1}{I_a} \sum_{i=1}^{I_a} K_i \quad (7-11)$$

در این رابطه K_i نشان دهنده‌ی ویژه مقدار نسل فعال i ام و I_a برابر با تعداد نسل‌های فعال می‌باشد. این رابطه برای هر سه برآورد کننده و همچنین برای میانگین برآورد کننده‌ها به صورت مجزا محاسبه می‌شود.

البته برای مشاهده روند تغییرات ضریب تکثیر بعد از اتمام هر نسل فعال (بعد از دومین نسل فعال)، متوسط مقدار ضریب تکثیر این نسل و نسل‌های فعال قبل از آن محاسبه و نمایش داده می‌شود.

واریانس نمونه‌ای این تخمین از ضریب تکثیر به صورت رابطه (۸-۱۱) محاسبه می‌شود.

$$\sigma_s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{I_a} K_i^2}{I_a - 1} - \frac{(\sum_{i=1}^{I_a} K_i)^2}{I_a(I_a - 1)} \quad (8-11)$$

لذا انحراف معیار مربوط به مقدار متوسط ضریب تکثیر به صورت رابطه‌ی (۹-۱۱) بدست می‌آید.

$$\sigma = \sigma_s / \sqrt{I_a} \quad (9-11)$$

در روابط واریانس و انحراف معیار فرض بر این است که بعد از رسیدن توزیع چشمه به حالت پایه، ویژه مقادیر نسلها مستقل می‌باشند یا به عبارتی دیگر هیچ همبستگی بین نسلها وجود ندارد! اما در عمل به دلیل تاثیر هر نسل بر روی چشمه‌های شکافت نسل بعد این فرض کاملاً درست نمی‌باشد و واریانس محاسبه شده کمی کوچک‌تر از مقدار واقعی آن تخمین زده می‌شود.

۱۱-۵- برآورد کننده‌ی طول پیمایش برای شار متوسط حجمی

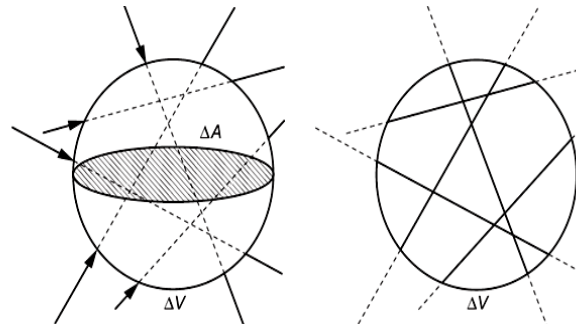
شار زاویه‌ای را می‌توان به صورت رابطه‌ی (۱۱-۱۰) تعریف نمود.

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \nu(E) N(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (11-10)$$

در رابطه‌ی فوق $\nu(E)$ سرعت نوترون و $N(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ برابر با چگالی نوترون‌ها در زمان t ، در مکان r ، بر واحد انرژی در و بر واحد زاویه‌ی فضایی در Ω می‌باشند. شار اسکالر نیز با رابطه‌ی (۱۱-۱۱) تعریف می‌شود.

$$\phi(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} \nu(E) N(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\Omega dE \quad (11-11)$$

در تئوری راکتور از شار اسکالر $\phi(\vec{r}, t)$ به عنوان کل مسافت پیمایش شده در واحد زمان توسط تمامی نوترون ها در واحد المان حجم dv حول مکان r در زمان t تعبیر می گردد. یک تعبیر معادل برای شار اسکالر، به صورت تعداد نوترون های عبور کرده از سطح یک کره ی کوچک با سطح مقطع ΔA در واحد زمان در لحظه ی t می باشد.



شکل ۵۶: نمایشی از دو تعبیر مختلف شار اسکالر

شار متوسط در حجم V با رابطه‌ی (۱۱-۱۲) بدست می‌آید. البته عبارت درست برای این رابطه، شاریدگی^{۶۴} متوسط می‌باشد، ولی در این گزارش از آن با همان عنوان شار متوسط یاد می‌شود.

$$\bar{\phi}_v = \frac{1}{V} \int dt \int dE \int dV \phi(\vec{r}, E, t) \quad (11-12)$$

با در نظر گرفتن $N(r, E, t)$ به عنوان چگالی نوترون‌ها در نقطه‌ی r صرف نظر از راستای حرکتشان و با تعریف نمودن $ds = vdt$ به عنوان مسافت پیموده شده در زمان dt توسط نوترون‌ها، می‌توان رابطه‌ی (۱۱-۱۲) را به رابطه‌ی (۱۱-۱۳) تبدیل نمود.

$$\bar{\phi}_v = \frac{1}{V} \int dV \int dE \int ds N(\vec{r}, E, t) \quad (11-13)$$

عبارت $N(r, E, t)ds$ نشان دهنده‌ی چگالی طول مسیر پیموده شده توسط نوترون‌ها می‌باشد، بنابراین شار متوسط را می‌توان با جمع نمودن طول مسیرهای پیموده شده (d) و با استفاده از رابطه‌ی (۱۱-۱۴) برآورد نمود. با این رابطه تمامی طول مسیرهای پیموده شده توسط نوترون‌ها در یک ناحیه جمع می‌شوند.

$$\bar{\phi}_V = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{k_i} W_{i,k} d_{i,k}}{N} = \frac{\sum_{i=1}^N \phi_i}{N} \quad (11-14)$$

در رابطه‌ی (۱۱-۱۴)، $d_{i,k}$ برابر با مسافت پیموده شده توسط نوترون i ام در حجم V (یا به طور کلی در فضای فاز) بین دو رخداد k و $k - 1$ است و $W_{i,k}$ وزن نوترون i قبل از برخورد k می‌باشد همچنین در این رابطه ϕ_i به معنای سهم تاریخی‌ی i ام در شار متوسط حجمی می‌باشد. در این رابطه شار متوسط حجمی به تعداد چشمه‌ها تقسیم شده است (N) تا شار حجمی متوسط ناشی از یک نوترون بدست بیاید.

باید به این نکته توجه داشت که این برآورد کننده همانند برآورد کننده‌های ضریب تکثیر در هر نسل برآورد نمی‌شوند، بلکه بعد از اتمام نسل‌های غیر فعال به طور تجمعی برای تمامی تاریخچه‌های موجود در نسل‌های فعال شمارش می‌شوند و در نهایت به وزن کل چشمه‌ی فعال ($w = N(I_t - I_c)$) بهنجار می‌شوند. در این رابطه N برابر با تعداد اسمی چشمه در هر نسل و I_t برابر با تعداد کل نسل‌ها و I_c برابر با تعداد نسل‌های غیر فعال می‌باشند. همچنین می‌توان نتایج را به تعداد واقعی ذرات شروع کننده در طول نسل‌ها بهنجار نمود. ممکن است خطاهایی در نتایج این تالی‌ها وجود داشته باشد البته این خطا نسبت به عدم قطعیت آماری کوچک‌تر است.

مقدار واریانس و انحراف معیار در این تقریب از شار متوسط حجمی با روابط (۱۱-۱۵) بدست می‌آید.

$$\sigma_{\bar{\phi}_V}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (\phi_i - \bar{\phi}_V)^2}{N(N-1)} \Rightarrow \sigma_{\bar{\phi}_V}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N \phi_i^2 - N(\bar{\phi}_V)^2}{N(N-1)} \quad \text{or} \quad \sigma_{\bar{\phi}_V}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N \phi_i^2 - N\left(\frac{\sum_{i=1}^N \phi_i}{N}\right)^2}{N(N-1)}$$

$$\phi_i = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{k_i} W_{i,k} d_{i,k} \quad (15-11)$$

$$\sigma_{\bar{\phi}_V} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \phi_i^2 - N\left(\frac{\sum_{i=1}^N \phi_i}{N}\right)^2}{N(N-1)}}$$

برآورد کننده طول مسیر عموماً جواب‌های اطمینان بخشی به دنبال دارد چرا که تعداد نمونه‌ها در این تالی زیاد می‌باشد.

۱۱-۵-۱- اندازه‌گیری شبکه‌ای دکارتی^{۶۵}

این روش یک ابزار مفید برای برآورد پارامترهای حجمی در مسائل مختلف بدون هر گونه تغییر در هندسه می‌باشد. در این روش، شبکه‌ای از سلول‌های منظم راست گوشه (مختصات دکارتی) برای اندازه‌گیری استفاده و در هر پیمایش سهم سلول‌های واحد درگیر در پیمایش محاسبه می‌شود. به دلیل مشخص بودن سلول واحد محاسبه حجم آن آسان می‌باشد.

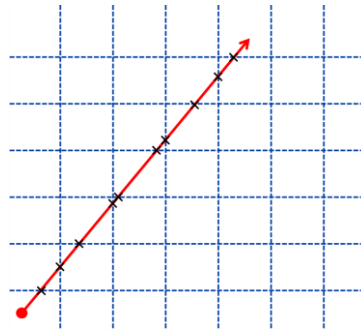
در این روش کاربر می‌تواند اندازه‌گیری خود را در شبکه‌ای از سلول‌های واحد با آدرس‌دهی مشخص انجام دهد و بدون تغییر در هندسه سیستم با کوچک کردن سلول‌های واحد، تفکیک‌پذیری^{۶۶} اندازه‌گیری را افزایش داد (البته ممکن است واریانس افزایش یابد). باید توجه داشت که سلول‌های واحد برای اندازه‌گیری شبکه‌ای، سلول‌های مجازی بوده و در ترابرد

۶۵ Cartesian Mesh Tally

۶۶ Resolution

نقشی ندارند و ترابرد بر اساس سلول‌های واقعی تشکیل دهنده سیستم صورت می‌پذیرد (همانند قرار دادن صفحه شطرنجی بر روی یک تصویر).

با تعیین محدوده و تعداد تقسیمات مربوط به هر بعد توسط کاربر، سلول‌های واحد و ابعاد آن مشخص می‌شود و می‌توان سهم هر پیمایش را در آنها محاسبه کرد.



شکل ۵۷: روش ثبت شار حجمی برای یک طول پیمایش در اندازه‌گیری شبکه‌ای

برای محاسبه شار حجمی در سلول‌های واحد مجازی باید طول پیمایشی که نوترون در حین ترابرد در آن سلول واحد از خود بر جا می‌گذارد، ذخیره شود. برای محاسبه این پارامتر، مسیر پیمایش در تقاطع با سطوح سلول واحد قطع می‌شود و فاصله نوترون تا سطوح سازنده سلول واحد جاری محاسبه شده و با مقایسه این فاصله‌ها با طول پیمایش (با توجه به جهت ترابرد)، محل برخورد با سطوح سلول واحد تعیین و بدین ترتیب طول پیمایشی که نوترون در این سلول واحد طی می‌کند محاسبه می‌گردد، پس از ثبت این فاصله، نوترون به محل برخورد با سلول واحد منتقل و مقدار انتقال از طول پیمایش کسر می‌شود و این عملیات تا انتهای طول پیمایش ادامه می‌یابد.

در این کد می‌توان در نواحی مختلف از طول مش‌های متفاوتی استفاده نمود. این کار باعث افزایش سرعت محاسبات شار می‌شود.

۱۲- الگوریتم محاسبات بحرانیت با روش تکرار چشمه^{۶۷}

برای انجام محاسبات بحرانیت در این گزارش از روش تکرار چشمه استفاده شده است. در این روش ترابرد نوترون‌ها بصورت نسلی شبیه‌سازی می‌شود و در هر نسل تعداد N چشمه نوترونی مطابق مباحث بیان شده در بخش ۱۲، ترابرد و کمیات مورد نظر از قبیل ضریب تکثیر، شار و ... شمارش می‌شوند. مراحل انجام محاسبات بحرانیت با این روش بصورت زیر قابل بیان است:

۱. مشخص کردن فضای فاز (مکان، گروه انرژی و راستای حرکت) چشمه‌های شکافت؛

- تعیین مکان چشمه نوترون.

- نمونه برداری راستای حرکت چشمه ی نوترونی شکافت به صورت همسانگرد.
- نمونه برداری گروه انرژی چشمه ی نوترونی با استفاده از طیف گروهی شکافت.
- ۲. مشخص شدن سطح مقاطع با توجه به گروه انرژی، مکان و راستای حرکت نوترون؛
- ۳. نمونه برداری طول پیمایش نوترون با توجه به سطح مقطع کل؛
- ۴. شبیه سازی هندسه ی سامانه؛
- محاسبه فاصله ی جهت دار نوترون تا مرز ناحیه.
- مقایسه ی طول پیمایش با فاصله ی جهت دار و تصحیح طول پیمایش در صورت لزوم: اگر طول پیمایش از فاصله جهت دار بیشتر باشد فاصله جهت دار به عنوان طول پیمایش در نظر گرفته می شود.
- محاسبه تخمین گرها و تالی های مربوط به طول پیمایش.

$$(K_{eff}^{TL})_m = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{c=1}^{c_i} W_{i,c} S_{i,c} \nu \Sigma_{fg}}{N}$$

- در صورت برخورد نوترون به مرز داخلی (در اثر تصحیح طول پیمایش)، مرحله ۲ بعد از تعیین ناحیه جدید برای ادامه‌ی فرآیند ترابرد دنبال می‌شود.
- در صورت برخورد نوترون به مرز خارجی سامانه (در اثر تصحیح طول پیمایش)، نوترون نابود و به تاریخچه‌ی آن خاتمه داده می‌شود و مرحله ۱ جهت پیگیری تاریخچه‌ی جدید دنبال می‌شود.
- انتقال نوترون به محل جدید با توجه به طول پیمایش.

۵. شبیه‌سازی فیزیک برخورد؛

- در این مرحله تخمین‌گرها و تالی‌های مربوط به روش برخورد محاسبه می‌شوند.

- اگر محیط برخورد شکافت پذیر باشد، آنگاه در نقطه‌ی برخورد مکان و تعداد نوترون‌های چشمه‌های نوترونی برای نسل بعدی ثبت می‌شود.
- در شبیه‌سازی ضمنی:

$$w = w(1 - \frac{\Sigma_{ag}}{\Sigma_{tg}})$$

- تعیین وزن جدید نوترون:

- محاسبه تخمین‌گرها و تالی‌های مربوط به روش جذب ضمنی.
- اگر وزن نوترون زیر وزن قطع باشد با استفاده از رولت روسی بقای نوترون بررسی می‌شود.
- در صورت بقا، وزن نوترون اصلاح می‌شود.
- در صورت حذف، ترابرد برای چشمه جدید از مرحله ۱ آغاز می‌شود.
- راستای حرکت و گروه انرژی نوترون پراکنده شده نمونه‌برداری و مرحله‌ی ۲ دنبال می‌شود.

• در شبیه سازی آنالوگ:

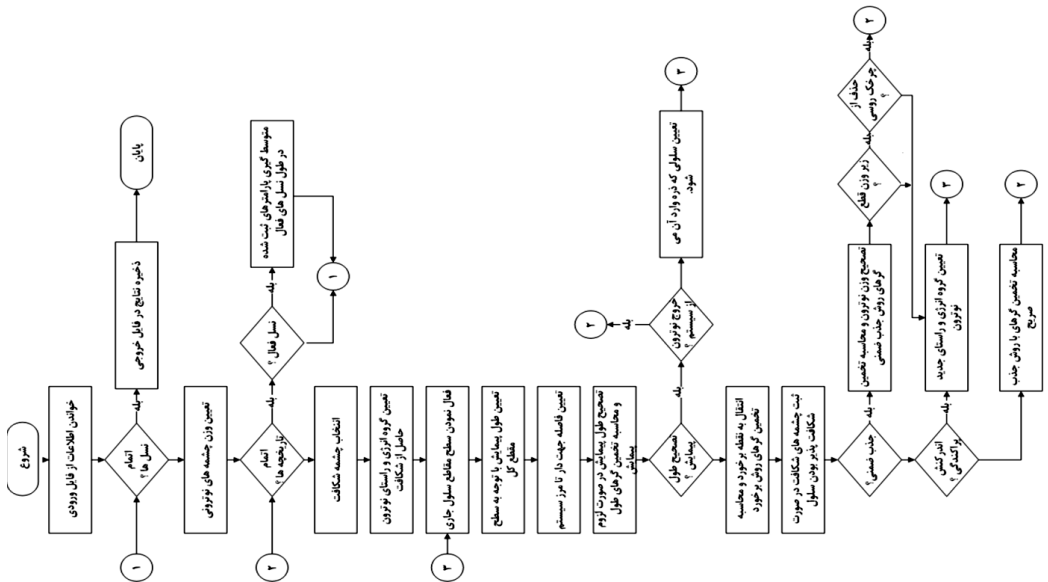
- نمونه برداری نوع اندرکنش (جذب یا پراکندگی)
- در صورت انتخاب اندرکنش جذب تخمین گرها و تالی های مربوط به روش جذب محاسبه می شوند. سپس نوترون نابود شده و ترابرد برای چشمه جدید از مرحله ۱ آغاز می شود.
- در صورتی که اندرکنش پراکندگی انتخاب شود راستای حرکت و گروه انرژی نوترون پراکنده شده نمونه برداری و مرحله ۲ دنبال می شود.

۶. اگر سرنوشت تمام نوترون ها در یک نسل (N) دنبال شده باشد آنگاه:

$$N' = \sum_{i=1}^N \sum_{c=1}^{c_i} n'_{i,c}$$

- مقادیر میانگین تخمین گرهای ضریب تکثیر در هر نسل و بین نسل های فعال محاسبه و نمایش داده می شوند.

۷. تعیین وزن جدید چشمه های نوترونی: $w = N/N'$ و نسل جدید با $N' = \sum_j n'_j$ نوترون آغاز می شود.



شکل ۵۸: روندنمای محاسبات بحرانی سامانه چند ناحیه ای ساده با سطح مقطع های گروهی

۱۳- رسم مقطع دو بعدی هندسه‌ی سیستم

همانطور که اشاره شده است یکی از قابلیت‌های مهم کد MCTRAN توانایی بسیار بالای آن در شبیه‌سازی سیستم‌هایی با هندسه‌ی پیچیده است. از طرفی رسم اشکال هندسی تعریف شده در شبیه‌سازی می‌تواند در درک بهتر مسئله و نیز بررسی صحت هندسه تعریف شده بسیار مفید باشد. از این رو در این کد زیرروالی برای رسم اشکال هندسی طراحی و پیاده سازی شده است.

منظور از رسم هندسه‌های تعریف شده، تعیین و رسم سطح مقطع حاصل از برخورد سلول‌ها و یک صفحه ترسیم^{۶۸} است. لازمه این امر تعیین نقاط تقاطع صفحه ترسیم و شکل هندسی مد نظر می‌باشد. به منظور سهولت در انجام محاسبات، ابتدا یک مختصات دو بعدی با توجه به صفحه ترسیم تعیین شده و سپس معادلات سایر سطوح به این مختصات انتقال

می یابد و در نهایت نقاط تقاطع اشکال هندسی حاصله تعیین می گردد. محاسبات مربوط به هر یک از این مراحل دارای جزئیاتی است که با توجه به نوع اشکال هندسی و سطوح تشکیل دهنده آنها تعیین می گردد. صفحه ترسیم می تواند یکی از سه نوع صفحه قابل تعریف در کد (PX, PY, PZ) باشد.

همان گونه که پیش از این ذکر شد، برای تعیین اشکال هندسی حاصل از تقاطع صفحه ترسیم و هندسه تعریف شده در مسئله و یا به عبارت دیگر تعیین سطح مقاطع تشکیل شده در صفحه ترسیم لازم است، معادلات مربوط به سطوح به کار رفته در تعریف هندسه و معادله صفحه ترسیم به طور همزمان حل گردند. با توجه به سه بعدی (سه متغیره) بودن این معادلات در حالت کلی، انجام عملیات مذکور کاری دشوار و در برخی موارد غیر ممکن می باشد. از آنجایی که سطح مقاطع حاصل شده در نهایت در یک مختصات دو بعدی و بر روی صفحه ترسیم تشکیل می شوند، به منظور سهولت در حل معادلات مذکور، ابتدا یک مختصات دو بعدی با توجه به صفحه ترسیم مد نظر تعیین شده و معادلات تمام سطوح به آن مختصات انتقال می یابد، سپس سطح مقطع ایجاد شده با توجه به این معادلات تعیین می گردد. پس از تعیین معادلات

مربوط به سطح مقطع، به منظور سهولت در رسم اشکال حاصله، یک مختصات تک بعدی نیز با استفاده از روابط و قوانین ریاضی موجود تعریف می‌گردد. بدین ترتیب مراحل به شرح زیر برای دستیابی به معادلاتی جهت رسم سطح مقاطع ایجاد شده، در نظر گرفته شده است:

1. تعیین مختصات دو بعدی (s, t) با توجه به معادله صفحه ترسیم و تعیین ماتریس انتقال به مختصات دو بعدی.
2. تعیین معادلات و فرم ماتریسی سطوح در مختصات مرجع (x, y, z) .
3. تبدیل مختصات اصلی (x, y, z) تمام سطوح به مختصات دو متغیره (s, t) .
4. انتقال معادلات حاصله به مختصات تک متغیره p .
5. تعیین نقاط تقاطع تمام سطوح و تعیین سطح مقطع تشکیل شده.

۱۴- راستی آزمایی

در این بخش به راستی آزمایی و اعتبارسنجی کد MCTRAN با استفاده از چندین مسئله نمونه پرداخته می شود. در این بخش با استفاده از محک های متعدد سعی شده است تا بخش های مختلف کد مورد بررسی قرار بگیرد.

۱۴-۱- محک های تحلیلی بحرانیت

۱۴-۱-۱- راستی آزمایی پراکندگی همسانگرد و ناهمسانگرد خطی

جواب های دقیق برای معادله ی ترابرد نوترون محدود به هندسه های ساده، تعداد گروه های محدود و مدل های پراکندگی ساده شده (همسانگرد و ناهمسانگرد خطی) می باشد. در جدول شماره ۸ و ۹ چند مسئله آزمون بحرانیت برای بررسی

صحت عملکرد کد MCTRAN ارائه شده است. تمام مقادیر بیان شده در جداول برای ابعاد بحرانی حداقل تا پنج رقم اعشار دقیق و صحیح می‌باشند. [۸]

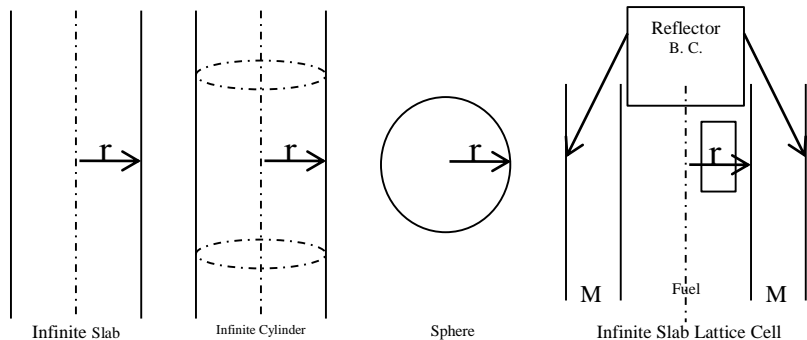
جدول شماره ۸: ابعاد بحرانی مسائل نمونه تحلیلی تک ناحیه‌ای

Reference Identifier	No. of Energy Group	Scattering Type	Geometry	Critical dimension (cm)
PUb-1-0	1	Isotropic	Slab	2.256751
			Cylinder	4.279960
			Sphere	6.082547
PU-2-0	1	Isotropic	Slab	1.795602
			Sphere	5.231567
UD20-2-1	2	Anisotropic	Slab	929.4500

جدول شماره ۹: ابعاد بحرانی مسائل نمونه تحلیلی دو ناحیه‌ای

Reference Identifier	No. of Energy Group	Scattering	Geometry	Fuel thickness (cm)	Reflector thickness (cm)
PUa-H2O(1)-1-0	1	Isotropic	Slab	1.47845	3.063725
PUb-H2O(1)-1-0	1	Isotropic	Cylinder	3.39761	3.063725
URRb-H2Oa(1)-2-0	2	Isotropic	Slab	6.696802	1.126152
URRd-H2Ob(1)-2-0-ISLC	2	Isotropic	Lat. Cell	0.0329074	9.034787

ابعاد بحرانی k_c به صورت زیر برای هندسه‌های تک ناحیه‌ای و دو ناحیه‌ای (شبکه‌ی تیغه‌ای بی‌نهایت) تعریف می‌شود.



شکل ۵۹: ابعاد بحرانی برای هندسه‌های تک ناحیه‌ای و سلول واحد یک ساختار شبکه‌ای بی‌نهایت

برای برآورد نمودن ضریب تکثیر برای محک‌های بیان شده در دو جدول، کد MCTRAN برای ۵۰۰۰۰۰ تاریخچه در هر نسل، ۱۰۰ نسل غیر فعال و ۲۰۰ نسل فعال اجرا شده است. در جدول شماره‌ی ۱۰ نتایج بدست آمده به همراه انحراف

معیار و همچنین درصد خطای نسبی نشان داده شده است. چنانچه از نتایج مشهود است اختلاف بین ضریب تکثیرها کمتر از ۶ pcm و در تمام موارد نتایج حداکثر با دو انحراف معیار شامل جواب دقیق ۱ می باشند.

جدول شماره ۱۰: نتایج کد MCTTRAN برای ضریب تکثیر موثر محک های تحلیلی

Reference Identifier	Geometry	K_{eff}	Standard Deviation	Relative error(pcm)
PUb-1-0	Slab	1.00002	0.00006	2
	Cylinder	1.00005	0.00007	5
	Sphere	0.99996	0.00006	4
PU-2-0	Slab	1.00004	0.00004	4
	Sphere	1.00004	0.00004	4
UD20-2-1	Slab	0.99994	0.00005	6
PUa-H2O(1)-1-0	Slab	1.00004	0.00009	4
PUb-H2O(1)-1-0	Cylinder	0.99997	0.00010	3
URRb-H2Oa(1)-2-0	Slab	0.99996	0.00013	4
URRd-H2Ob(1)-2-0-ISLC	Lat. Cell	1.00003	0.00014	3

۱۴-۱-۲- راستی آزمایی چند گروهی با پراکندگی ناهمسانگرد مرتبه دو لژاندر

در این بخش از یک راستی آزمایی تحلیلی برای صحت سنجی کد MCTRAN استفاده شده است. این مسئله، یک تیغه بحرانی یک گروهی با پراکندگی ناهمسانگرد (تا مرتبه ۲ لژاندر) می باشد. سطح مقاطع مربوط به آن در جدول ۱۴۱۱ نشان داده شده است.

جدول ۱۴ شماره ۱۱: سطح مقاطع ناهمسانگرد ماکروسکوپی یک گروهی برای سیستم بحرانی

v	Σ_f	Σ_c	Σ_{s0}	Σ_{s1}	Σ_{s2}	Σ_t	C
2.5	0.266667	0	0.733333	0.2	0.075	1	1.4

ابعاد بحرانی این سیستم با در نظر گرفتن مرتبه اول و دوم پراکندگی به ترتیب ۱.۵۴۰۶۴ و ۱.۵۲۷۵۶ سانتیمتر می باشد. برای بررسی بیشتر علاوه بر سطح مقاطع یک گروهی، سطح مقاطع شش گروهی از آن استخراج و نتایج آن بررسی شده است. معادله ترابرد را در یک بعد می توان به صورت رابطه ویژه مقداری زیر نشان داد:

$$\mu \frac{\partial \psi(z, \mu)}{\partial z} + \psi(z, \mu) = \frac{C}{2} \int_{-1}^1 \psi(z, \mu') d\mu'$$

در این رابطه پارامتر C بیانگر تعداد متوسط نوترون‌های ثانویه تولید شده به ازای هر اندرکنش نوترون می‌باشد و با نام نسبت ثانویه ^{۶۹} شناخته می‌شود:

$$C = \frac{\nu \Sigma_f + \Sigma_s / k_{eff}}{\Sigma_t}$$

بنابراین در محاسبات یک بعدی با ثابت نگهداشتن این پارامتر می‌توان تعداد گروه‌های انرژی را افزایش داد در حالی که پاسخ سیستم و ضریب تکثیر آن ثابت باشد. جدول شماره ۱۲ نتایج مربوط به ضریب تکثیر این سیستم بحرانی را در یک و شش گروه با در نظر گرفتن مرتبه اول و دوم بسط لژاندر نشان می‌دهد. نتایج، دقت مناسب کد MCTRAN را در محاسبه

ضریب تکثیر موثر در محیط‌های ناهمسانگرد نشان می‌دهد.

جدول شماره ۱۲: ضریب تکثیر سیستم بحرانی ناهمسانگرد با یک و شش گروه

	1Group – P1	1Group – P2	6Group – P1	6Group – P2
MCTAN(+/-0.00007)	0.99996	0.99999	1.00001	0.99999
Error (pcm)	4	1	1	1

۱۴-۲- محک صحت پیاده‌سازی احجام هندسی

در این بخش برای اطمینان از صحت عملکرد برنامه در ساخت سطوح بسته نتایج محاسبات بحرانی دو کد MCNP5 و MCTAN برای چند مثال با هم مقایسه شده است. از آنجائی که زیرروال سطوح بسته صرفاً بر هندسه و ردیابی شبیه‌سازی

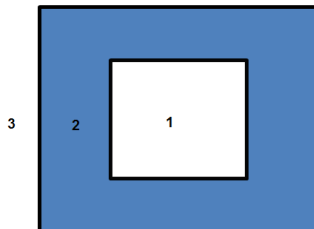
تاثیر می گذارد لذا در تمامی مثال ها یک ماده با سطح مقطع یک گروهی در نظر گرفته شده است. در این آزمون ها از پلوتونیوم ۲۳۹ (PUa-1-0) با خواص داده شده در جدول شماره ی ۱۳ استفاده شده است.

جدول شماره ۱۳: سطح مقاطع یک گروهی PUb-1-0

Group	ν	Σ_f	Σ_c	Σ_s	Σ_t
1	3.24	0.081600	0.019584	0.225216	0.32640

۱۴-۲-۱- آزمون اول

در این مثال هندسه ی سیستم محدود به فضای بین دو مکعب در نظر گرفته شده است. مکعب درونی به ضلع ۲ سانتی متر و مکعب بیرونی به طول ۴ سانتی متر می باشد. این مسئله به ازای ۵۰ نسل غیر فعال، ۳۵۰ نسل فعال و برای ۱۰۰۰۰۰ تاریخچه در هر نسل با استفاده از دستور سطح بسته در کدی MCTTRAN و MCNP5 اجرا و نتایج آن در جدول شماره ی ۱۴ بیان شده است.



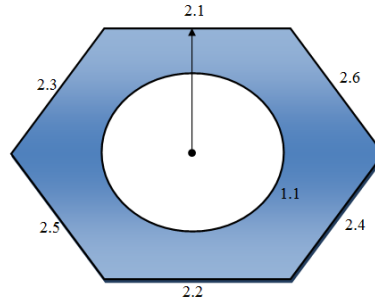
شکل ۶۰: نمای دو بعدی هندسه سیستم مورد بررسی در آزمون اول

جدول شماره ۱۴: نتایج مربوط به ضریب تکثیر موثر برای آزمون اول

	k_{eff}	standard deviation	Error (pcm)
MCNP5	1.34951	0.00024	-
MCTran-3D	1.34955	0.00023	4

۱۴-۲-۲-آزمون دوم

در این مثال هندسه‌ی سیستم محدود به فضای بین یک استوانه و یک منشور شش ضلعی منتظم در نظر گرفته شده است. استوانه به شعاع ۵ سانتی‌متر و ارتفاع ۵ سانتی‌متر در نظر گرفته شده است. مرکز قاعده‌ی پایین استوانه در مبدا قرار دارد. ضمناً محور استوانه با بردار $(5,0,0)$ مشخص می‌باشد. مرکز قاعده‌ی پایین منشور در نقطه‌ی $(-2,0,0)$ قرار دارد. محور منشور با بردار $(0,0,9)$ بیان شده است. بردار ۲ نیز برابر $(0,8,0)$ این مسئله به ازای ۷۰ نسل غیر فعال، ۳۳۰ نسل فعال و برای ۵۰۰۰۰ تاریخچه در هر نسل با استفاده از دستور سطح بسته در کدی MCTRAN و MCNP5 اجرا و نتایج آن در جدول شماره‌ی ۱۵ بیان شده است.



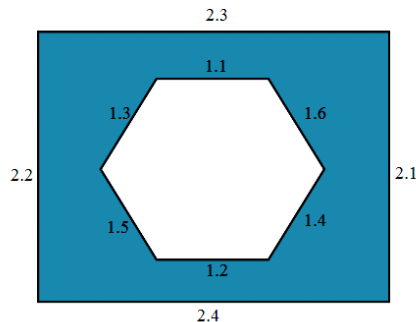
شکل ۶۱: نمای برشی هندسه سیستم مورد بررسی در آزمون دوم

جدول شماره ۱۵: نتایج مربوط به ضریب تکثیر موثر برای آزمون دوم

	k_{eff}	standard deviation	Error (pcm)
MCNP5	0.88465	0.00014	-
MCTran-3D	0.88456	0.00013	9

۱۴-۲-۳-آزمون سوم

در این مثال هندسه‌ی سیستم محدود به فضای بین یک منشور شش ضلعی منتظم و یک مکعب در نظر گرفته شده است. گوشه‌ی مکعب در مبدا واقع شده و بردار از گوشه تا رویه اول برابر $(0, 0, 10)$ و بردار از گوشه تا رویه دوم برابر $(0, 0, 10)$ و بردار از گوشه تا رویه سوم برابر $(0, 0, 10)$ در نظر گرفته شده است. مرکز قاعده‌ی پایین منشور در نقطه‌ی $(2, 5, 5)$ قرار دارد. محور منشور با بردار $(0, 0, 5)$ بیان شده است. بردار ۲ نیز برابر $(0, 3, 0)$ در نظر گرفته شده است. این مسئله به ازای ۷۰ نسل غیر فعال، ۳۳۰ نسل فعال و برای ۵۰۰۰۰ تاریخچه در هر نسل با استفاده از دستور سطح بسته در کدی MCNP5 و MCTRAN اجرا و نتایج آن در جدول شماره‌ی ۱۶ بیان شده است.



شکل ۶۲: نمای برشی هندسه سیستم مورد بررسی در آزمون سوم

جدول شماره ۱۶: نتایج مربوط به ضریب تکثیر موثر برای آزمون سوم

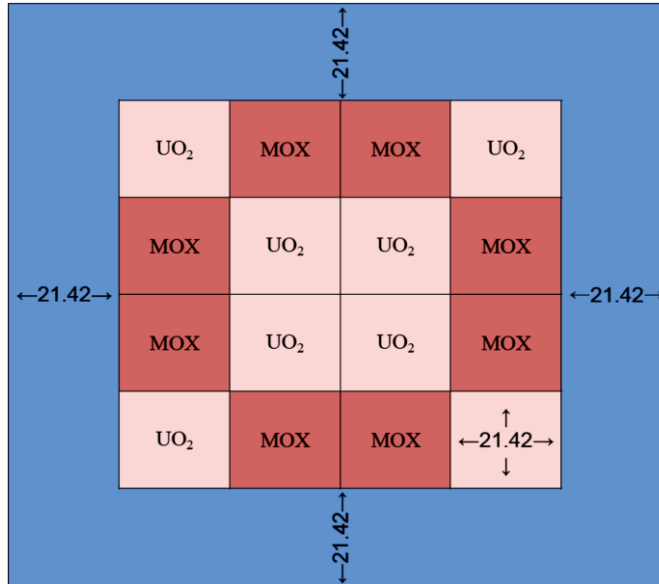
	k_{eff}	standard deviation	Error (pcm)
MCNP5	0.90300	0.00014	-
MCTran	0.90287	0.00014	13

۱۴-۳- راستی آزمایشی ساختار تکرار شونده

۱۴-۳-۱- راستی آزمایشی شبکه مربعی

برای راستی آزمایشی قابلیت تعریف هندسه‌های تکرار شونده در کد MCTRAN، از این کد برای انجام محاسبات بحرانیت مسئله نمونه C5G7 استفاده شده است. این مسئله یک مسئله بحرانیت با ۷ گروه انرژی می‌باشد. هندسه این سیستم سه بعدی بوده و از ۱۶ مجتمع سوخت با تقارن یک هشتم که از هر طرف با کند کننده‌ای به ضخامت ۲۱.۴۲ احاطه شده، تشکیل می‌شود (شکل ۶۳).

مرز خارجی سیستم، مرز خلأ در نظر گرفته شده است. هر مجتمع سوخت با ابعاد ۲۱.۴۲×۲۱.۴۲ سانتیمتر از یک آرایش ۱۷×۱۷ از سلول‌های واحد مربعی تشکیل شده است.



شکل ۶۳: هندسه مسئله راستی آزمایی C5G7 متشکل از ۱۶ مجتمع سوخت و بازتابنده

هر سلول واحد با ابعاد $1.26 \times 1.26 \times 1.26$ سانتیمتر شامل یک میله به شعاع 0.54 سانتیمتر، حاوی سوخت $4.3\% \text{ MOX}, \text{UO}_2$ ، $7.0\% \text{ MOX}$ ، $8.7\% \text{ MOX}$ و میله‌های راهنما ^{238}Pu و ^{235}U و کاند کننده آب اطراف آن می‌باشد.

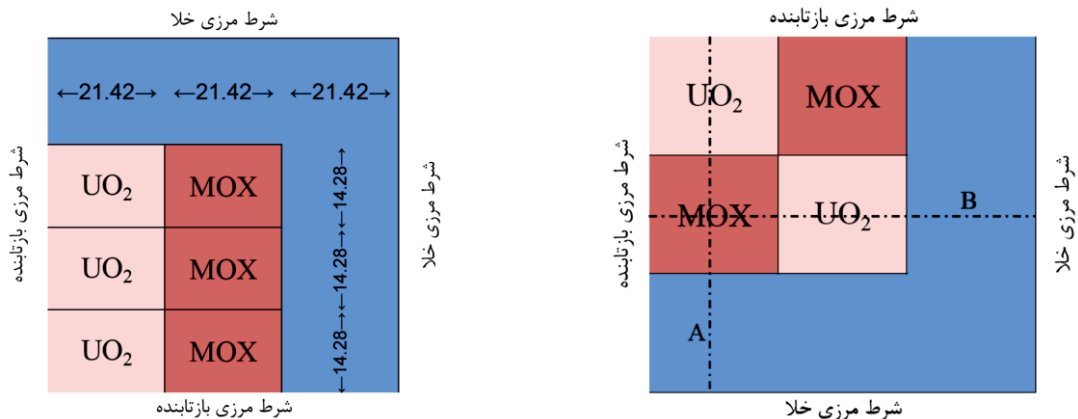


شکل ۶۴: سلول واحد مسئله راستی‌آزمایی C5G7

نمای افقی و عمودی از این مسئله در شکل ۶۵ نشان داده شده است. برای نمایش آرایش‌های مختلف این مسئله دو خط برش A و B در نمای افقی مشخص شده است.

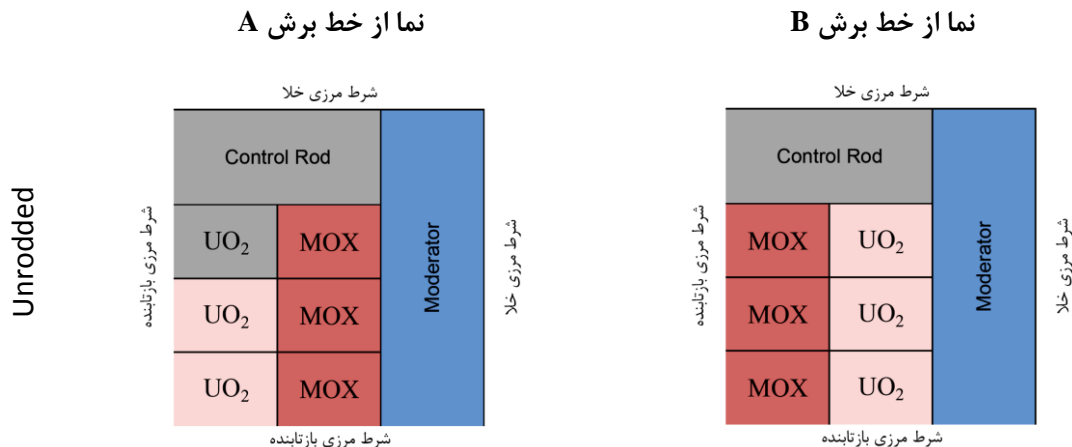
Guide Tube Y۰

Fission Chamber Y۱



شکل ۶۵: تقارن یک چهارم، نمای افقی و عمودی مسئله راستی آزمایی C5G7

برای راستی آزمایی از آرایش Rodded-A مربوط به مسئله سه بعدی C5G7 استفاده شده است. شکل ۶۶ نمای مربوط به برش A و B از این آرایش را نشان می دهد.



شکل ۶۶: تقارن یک چهارم، نمای عمودی آرایش Rodded-A مسئله راستی آزمایی C5G7

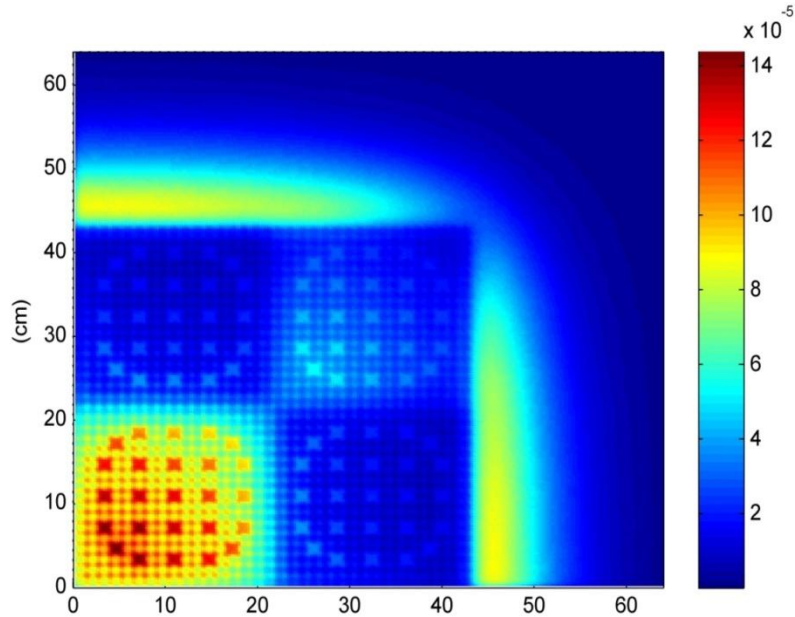
در این قسمت نتایج کد MCTRAN (کد توسعه داده شده در قسمت محاسبات احتمالاتی ترابرد)، که با ۱۵۰ سیکل غیرفعال، ۱۳۵۰ سیکل فعال و در هر سیکل ۵۰۰۰۰ تاریخچه اجرا شده است، با نتایج C5G7، که با استفاده از کد

MCNP5 بدست آمده، راستی آزمایی شده است. همانطور که در جدول شماره ۱۷ مشاهده می شود، مقدار ضریب تکثیر با خطای کمتر از ۴ pcm برای این مسئله به وسیله کد MCTTRAN محاسبه شده است.

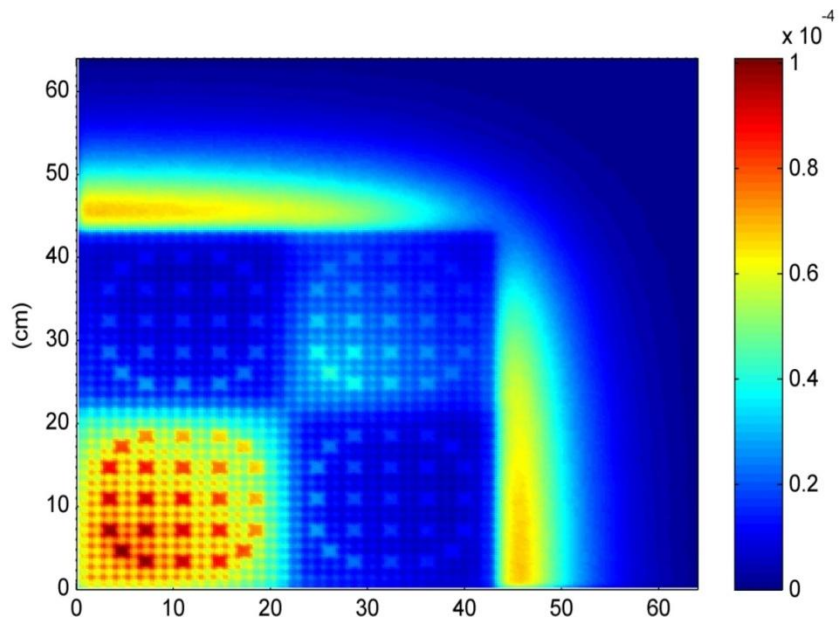
جدول شماره ۱۷: ضریب تکثیر مؤثر آرایش (C5G7) Rodded-A

کد محاسباتی	k_{eff}
MCTTRAN	1.12810±0.00006
مرجع	1.12806
خطای نسبی (pcm)	3.54

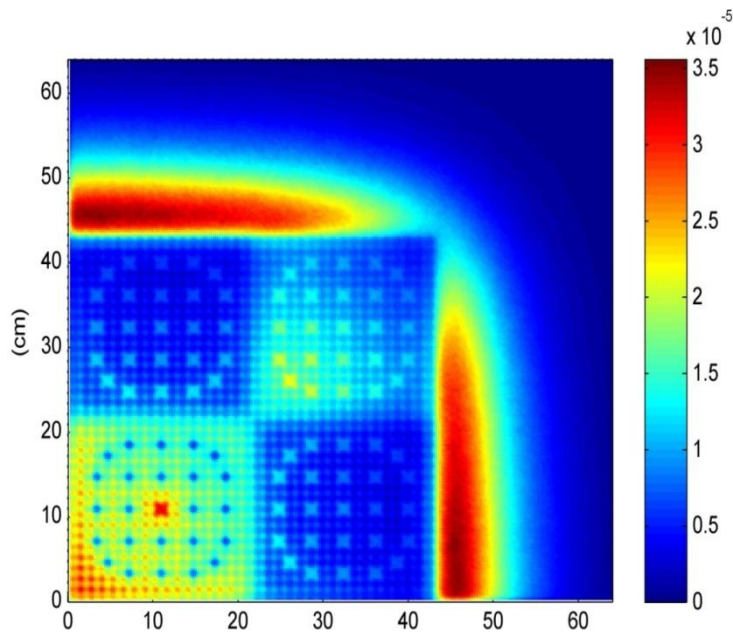
برای صحت سنجی دقیق تر کد MCTTRAN، توزیع توان برای آرایش (C5G7) Rodded-A مقدار توان در راستای محوری برای سه قسمت محاسبه شده است. شکل های ۶۷، ۶۸، ۶۹ و ۷۰ نمایی از توزیع توان را در این قسمت ها نشان می دهد.



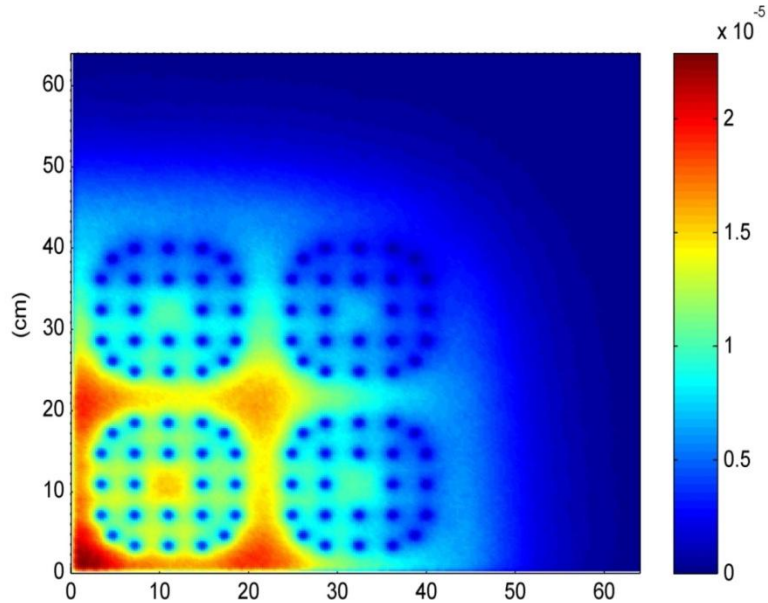
شکل ۶۷: توزیع شار نوترون گروه ۱ برای لایه اول آرایش Rodded-A (C5G7)



شکل ۶۸: توزیع شار نوترون گروه ۱ برای لایه دوم آرایش Rodded-A (C5G7)



شکل ۶۹: توزیع شار نوترون گروه ۱ برای لایه سوم آرایش Rodded-A (C5G7)



شکل ۷۰: توزیع شار نوترون گروه ۱ برای لایه چهارم آرایش Rodded-A (C5G7)

برای مقایسه عددی توزیع توان، توان متوسط برای مجتمع سوخت‌های مختلف آرایش Rodded-A (C5G7) و همچنین بیشینه توان میله‌ای (MPP) در سه لایه، در جدول شماره ۱۸ آورده شده است.

جدول شماره ۱۸: متوسط و بیشینه توان میله‌ای برای مجتمع‌های مختلف آرایش Rodded-A (C5G7)

	لایه اول			لایه دوم			لایه سوم		
	MCNP	MCTran	Error(%)	MCNP	MCTran	Error(%)	MCNP	MCTran	Error(%)
UO2-1	237.41	236.18	0.519	167.51	168.23	0.429	56.26	56.535	0.493
MOX	104.48	104.10	0.363	78.01	78.30	0.375	39.23	39.402	0.444
UO2-2	69.80	69.34	0.661	53.39	53.75	0.681	28.21	28.366	0.563
MPP	1.197	1.187	0.803	0.832	0.838	0.775	0.832	0.838	0.775

۱۴-۳-۲- راستی آزمایی ساختار تکرار شونده شش گوش سه بعدی، یک گروهی ناهمسانگرد

در این بخش محاسبات بحرانیت برای یک سیستم سه بعدی شش گوش، یک گروهی ناهمسانگرد بوسیله کد MCTRAN انجام شده است و با نتایج کد MCNP5 مقایسه شده است.

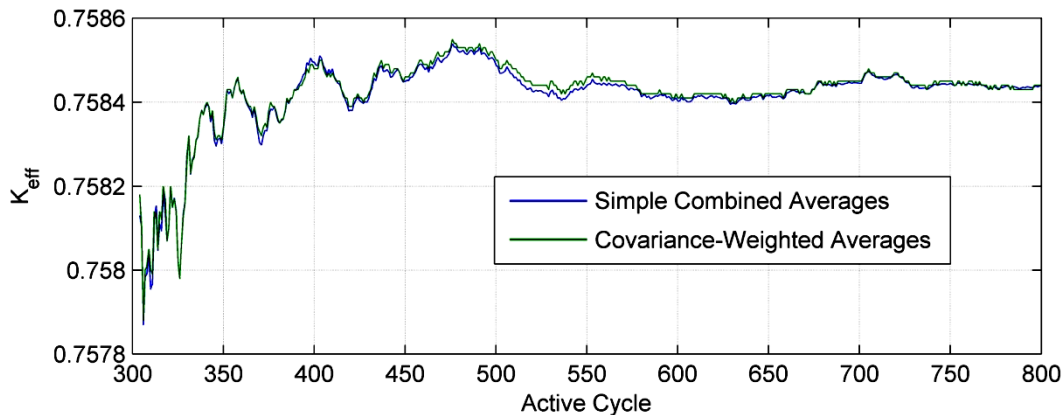
سطح مقاطع یک گروهی مربوط به مواد تشکیل دهنده این سیستم در جدول ۱۹ آورده شده است.

جدول شماره ۱۹: سطح مقاطع ناهمسانگرد ماکروسکوپی یک گروهی (راستی آزمایی شش گوش)

شماره ماده	$\Sigma(cm^{-1})$	$\Sigma_{s0}(cm^{-1})$	$\Sigma_{s1}(cm^{-1})$	$\nu\Sigma_f(cm^{-1})$
1	0.025	0.013	0.0	0.0155
2	0.025	0.024	0.006	0.0.
3	0.075	0.0	0.0	0.0

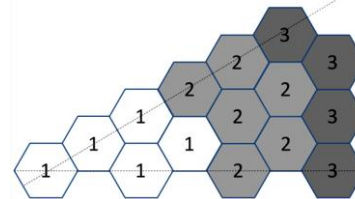
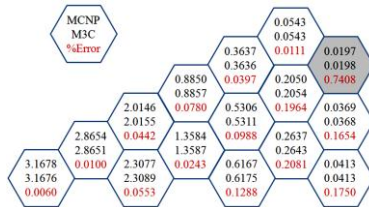
شکل ۷۲، هندسه این سیستم را با تقارن یک دوازدهم نشان می‌دهد. این سیستم از سه لایه با آرایش مختلف، که به ترتیب در ارتفاع ۵۰، ۶۰ و ۷۰ سانتیمتر قرار دارند، تشکیل شده است که در پایین آن شرط بازتابنده و در بالا و اطراف آن شرط خلا برقرار است.

ضریب تکثیر موثر این سیستم با استفاده از ۵۰۰ سیکل فعال و در هر سیکل ۱۰۰۰۰۰ تاریخچه با استفاده از کد MCNP5 برابر ۰.۷۵۸۴۵ با انحراف معیار ۰.۰۰۰۰۰۶ می‌باشد. با استفاده از کد MCTTRAN و شرایط اجرای یکسان ضریب تکثیر آن ۰.۷۵۸۴۴ بدست آمده که در حدود یک pcm اختلاف دارد.

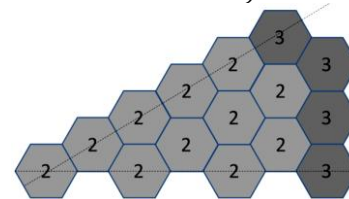
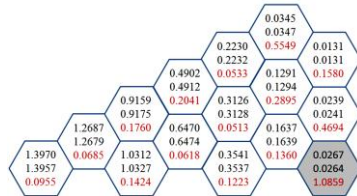


شکل ۷۱: ضریب تکثیر موثر ترکیبی با متوسط گیری معمولی و وزن شده کوواریانسی

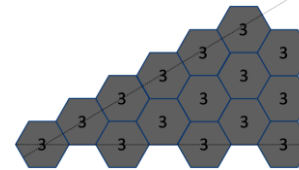
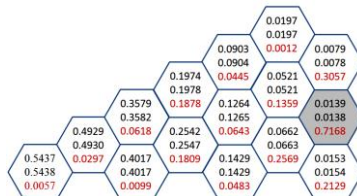
در شکل ۷۲ علاوه بر هندسه، توزیع شار محاسبه شده بوسیله دو کد MCNP و MCTRAN و درصد خطای نسبی آن نشان داده شده است. بیشینه خطای مربوط به هر لایه با رنگ تیره تر مشخص شده است.



0 < z < 50)



50 < z < 60)



60 < z < 70)

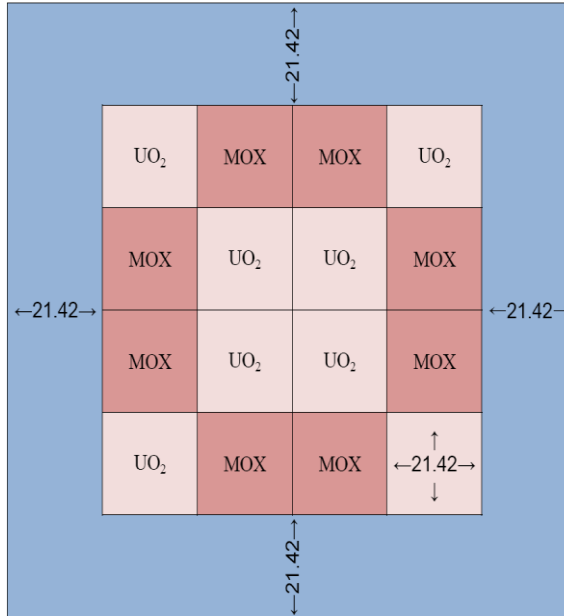
شکل ۱۴۷۲: توزیع شار و هندسه مسئله راستی آزمایشی شش گوش، سه بعدی، تک گروهی

مقادیر ضریب تکثیر موثر برای این سیستم به وسیله کدهای ترابرد یقینی محاسبه شده است ولی به دلیل تفاوت زیاد بین مقادیر محاسبه شده با در نظر گرفتن مرتبه‌های مختلف شار، نتایج مربوط به کد MCTTRAN با نتایج کد MCNP5 صحتسنجی شده است. نتایج، دقت مناسب کد MCTTRAN را برای محاسبه ضریب تکثیر موثر و توزیع شار برای هندسه‌های مختلف همراه با ناهمسانگردی نشان می‌دهد.

۱۴-۴- راستی آزمایی شرایط مرزی

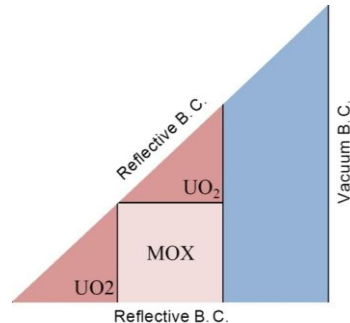
۱۴-۴-۱- راستی آزمایی شرط مرزی عادی و بازتابنده

برای راستی آزمایی شرایط مرزی عادی و بازتابنده از آرایش Rodded-A مسئله راستی آزمایی C5G7 استفاده شده است. این مسئله یک مسئله بحرانیت با ۷ گروه انرژی می‌باشد. هندسه این سیستم سه بعدی بوده و از ۱۶ مجتمع سوخت با تقارن یک هشتم که از هر طرف با کند کننده‌ای به ضخامت ۲۱.۴۲ احاطه شده، تشکیل می‌شود (شکل ۷۳).



شکل ۷۳: هندسه مسئله راستی آزمایی C5G7 متشکل از ۱۶ مجتمع سوخت و بازتابنده

مرز خارجی سیستم، مرز خلأ در نظر گرفته شده است. هر مجتمع سوخت با ابعاد $21.42 * 21.42$ سانتیمتر از یک آرایش $17 * 17$ از سلول‌های واحد مربعی تشکیل شده است. توصیف کامل این مسئله در گزارش ANC-RPT-TEP-CC-204 آورده شده است. برای صحت‌سنجی شرط مرزی بازتابنده و عادی از تقارن $1/8$ در تعریف هندسه این مسئله استفاده شده است (شکل ۷۴).



شکل ۷۴: تقارن $1/8$ هندسه مسئله راستی‌آزمایی C5G7 با استفاده از شرط مرزی بازتابنده

استفاده از مرزهای بازتابنده، با فرض ثابت نگه داشتن تعداد تاریخچه‌ها، باعث می‌شود تا پیمایش‌ها در نیمه متقارن با توجه به تقارن چند برابر شود. باید توجه داشت که مجموع پیمایش‌ها در حالت متقارن و کامل ثابت می‌ماند. برای روشن تر شدن اثر استفاده از تقارن در شبیه سازی دو پارامتر ضریب تکثیر و توان میله‌ای برای دو حالت قلب کامل و قلب با تقارن ۱/۸ مورد بررسی قرار گرفته است.

ضریب تکثیر آرایش C5G7 Rodded-A با در نظر گرفتن کل قلب در شبیه‌سازی و استفاده از تقارن ۱/۸ در جدول ۲۰ نشان داده شده است. از آنجائیکه ضریب تکثیر و خطای آن به مجموع پیمایش‌های نوترون در محیط بستگی دارد و وجود مرزهای بازتابنده این مجموع را تقریباً بدون تغییر نگه می‌دارد، همانطور که در این جدول مشهود است، استفاده از مرزهای بازتابنده تاثیر چندانی در مقدار و واریانس ضریب تکثیر ندارد.

جدول شماره ۲۰: ضریب تکثیر مؤثر آرایش (C5G7) Rodded-A

تقارن ۱/۸	کل قلب	مرجع	
1.12814	1.12800	1.12806	ضریب تکثیر
0.00006	0.00006	0.00003	انحراف معیار
7	5	-	خطای نسبی (pcm)

از طرفی افزایش مثبت مقادیر در ناحیه متقارن سبب کاهش خطا و واریانس می‌شود. در جدول ۲۱ و ۲۲، مقدار متوسط و بیشینه توان میله‌ای برای مجتمع‌های مختلف آرایش (C5G7) Rodded-A و خطای نسبی آن به ترتیب در حالت کل قلب و تقارن ۱/۸ آورده شده است. مقادیر این دو جدول این نتیجه را بخوبی نشان می‌دهد.

جدول شماره ۲۱: متوسط و بیشینه توان میله‌ای مجتمع‌های مختلف آرایش Rodded-A (C5G7)-کل قلب

	لایه اول			لایه دوم			لایه سوم		
	MCNP	MCTran	Error(%)	MCNP	MCTran	Error(%)	MCNP	MCTran	Error(%)
UO2-1	237.41	236.73	0.285	167.51	167.13	0.228	56.26	56.31	0.101
MOX	104.48	104.72	0.226	78.01	78.16	0.201	39.23	39.31	0.212
UO2-2	69.80	70.01	0.307	53.39	53.31	0.149	28.21	28.12	0.306
MPP	1.197	1.203	0.506	0.832	0.824	0.943	0.832	0.306	0.596

جدول شماره ۲۲: متوسط و بیشینه توان میله‌ای مجتمع‌های مختلف آرایش Rodded-A (C5G7) - ۱/۸ قلب

	لایه اول			لایه دوم			لایه سوم		
	MCNP	MCTRAN	Error(%)	MCNP	MCTRAN	Error(%)	MCNP	MCTRAN	Error(%)
UO2-1	237.41	237.59	0.077	167.51	167.55	0.025	56.26	56.23	0.053
MOX	104.48	104.48	0.004	78.01	77.98	0.035	39.23	39.21	0.054
UO2-2	69.80	69.71	0.135	53.39	53.39	0.015	28.21	28.19	0.07
MPP	1.197	1.195	0.131	0.832	0.832	0.03	0.832	0.304	0.093

مقادیر و خطاهای محاسبه شده برای ضریب تکثیر و توان میله‌ای در حالت کل قلب و حالت متقارن که در جداول ۲۰، ۲۱ و ۲۲ آورده شده است، صحت مدل‌سازی مرزهای بازتابنده را در کد MCTRAN نشان می‌دهد.

۱۴-۴-۲- راستی آزمایی شرط مرزی سفید

برای راستی آزمایی مرز سفید، از اعمال آن بر روی مرز خارجی سلول واحد سوخت UO_2 از مسئله راستی آزمایی C5G7 استفاده شده است. جدول ۲۳، ضریب تکثیر محاسبه شده با استفاده از دو کد MCNP و MCTran و خطای نسبی آن را برای این مسئله نشان می دهد.

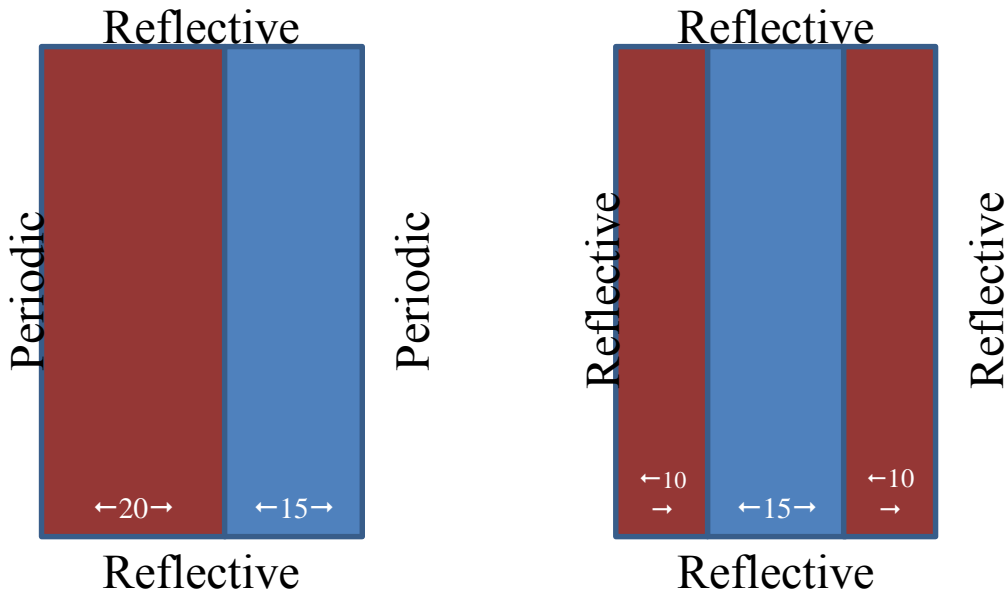
جدول شماره ۲۳: ضریب تکثیر مؤثر سلول واحد سوخت UO_2 از مسئله راستی آزمایی C5G7 با مرز سفید

MCTran	MCNP	
1.32527	1.32527	ضریب تکثیر
0.00012	0.00014	انحراف معیار
0	-	خطای نسبی (pcm)

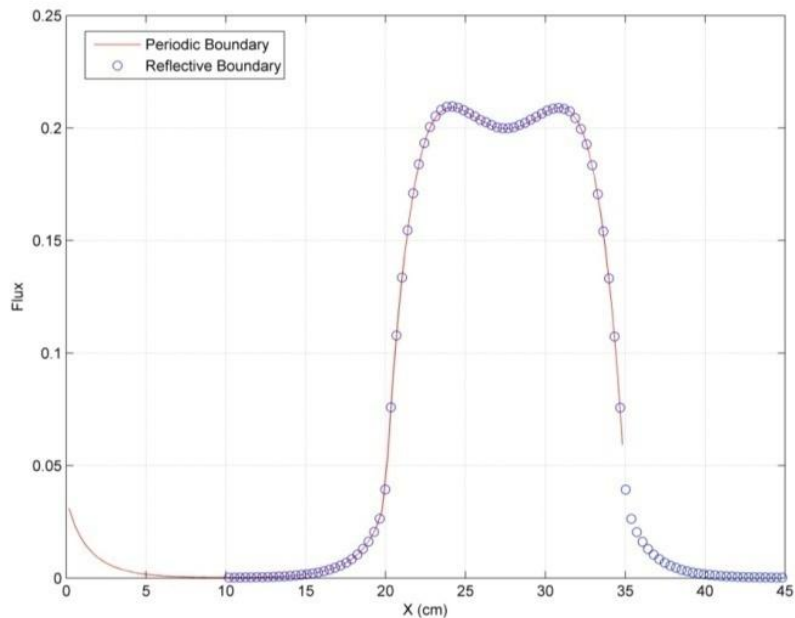
۱۴-۴-۳- راستی آزمایی شرط مرزی متناوب

در سیستم تیغه‌ای ساده می‌توان مرز متناوب را با کمی تغییرات هندسی با مرز بازتابنده مدل‌سازی کرد. شکل ۷۵، یک سیستم با هندسه تیغه‌ای و مرز متناوب را به همراه مدل مشابه با مرز بازتابنده نشان می‌دهد.

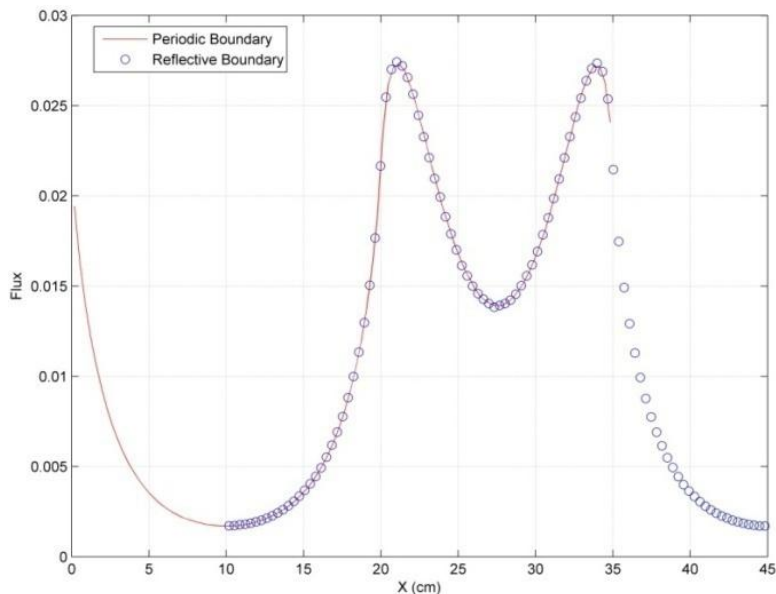
از مقایسه ضریب تکثیر و شار گروهی این دو سیستم برای راستی‌آزمایی مدل‌سازی مرز متناوب استفاده شده است. شکل‌های ۷۶، ۷۷ و ۷۸ به ترتیب شار مربوط به گروه‌های ۱، ۴ و ۷ را برای سیستم متناوب و بازتابنده نشان می‌دهد. جدول ۲۴ نیز ضریب تکثیر دو سیستم را نشان می‌دهد که خطایی در محدوده انحراف معیار ضرایب تکثیر دارد. تطابق خوب نتایج نشان‌دهنده صحت پیاده‌سازی مرز متناوب می‌باشد.



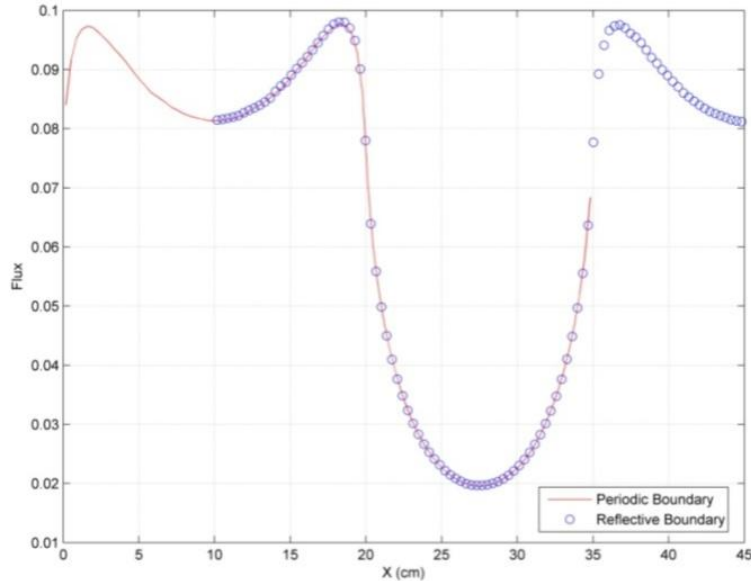
شکل ۷۵: سیستم تیغه‌ای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده



شکل ۷۶: مقایسه شار گروه ۱ سیستم تیغهای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده



شکل ۷۷: مقایسه شار گروه ۴ سیستم تیغه‌ای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده



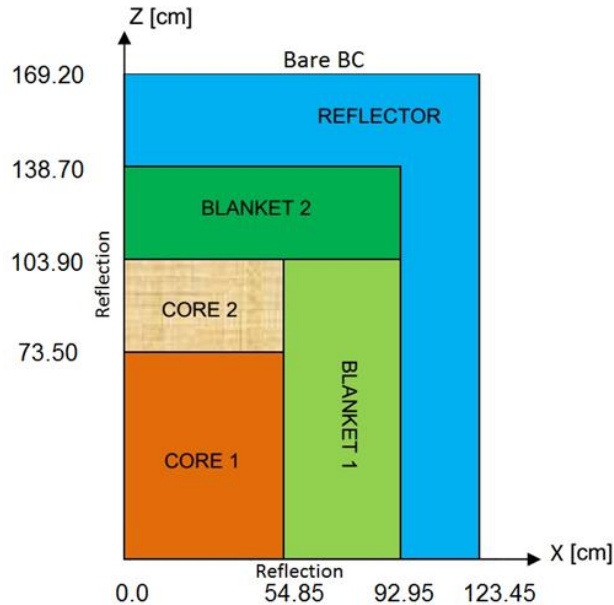
شکل ۷۸: مقایسه شار گروه ۷ سیستم تیغه‌ای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده

جدول شماره ۲۴: ضریب تکثیر سیستم تیغه‌ای دو ناحیه‌ای با مرز متناوب و سیستم معادل آن با مرز بازتابنده

مرز متناوب	مرز بازتابنده	
0.64876	0.064884	ضریب تکثیر
0.00011	0.00010	انحراف معیار
۱۲	-	خطای نسبی (pcm)

۱۴-۵- راکتور LMMFBR در هندسه X-Z

آزمون مورد بحث در این بخش، یک مسئله چهار گروهی دو بعدی است. به علت وجود تقارن در هندسه این راکتور، کافی است مسئله تنها برای یک چهارم آن حل شود. از سطوح مقاطع مربوط به مرجع [31] در این آزمون استفاده شده است. هندسه مربوط به راکتور LMFBR در شکل ۷۹ نشان داده شده است.



شکل ۷۹: هندسه راکتور LMFBR

نتایج حاصل در جدول ۲۵ مقایسه شده‌اند.

جدول شماره ۲۵: مقایسه نتایج مربوط به راکتور LMFBR

MCTRAN	MCNP	
1.05772	1.05721	ضریب تکثیر
0.00034	0.00025	انحراف معیار
0.00048	-	خطای نسبی (pcm)

۱۴-۶- راکتور LMFBR در هندسه R-Z

این آزمون در واقع بررسی آزمون قبل در مختصات R-Z است. به عبارت دیگر هندسه این آزمون یک استوانه است که از دوران هندسه شکل ۷۹ حول محور Y حاصل می‌شود. بنابراین شرایط مرزی و مواد به کار رفته در این آزمون متناظر با

آزمون قبل است. بنابراین یک راکتور استوانه‌ای به ارتفاع ۳۳۸.۴ سانتیمتر و شعاع ۱۲۳.۴۵ هندسه مورد بحث در این آزمون است. نتایج حاصل در جدول شماره ۲۶ مقایسه شده است.

جدول شماره ۲۶: مقایسه نتایج مربوط به راکتور LMFBR در هندسه R-Z

MCTRAN	MCNP	
0.94222	0.94285	ضریب تکثیر
0.00014	0.00002	انحراف معیار
0	-	خطای نسبی (pcm)

۱۵- نتیجه گیری

در این پروژه یک کد محاسباتی سه بعدی ترابرد نوترون برای محاسبات گروهی بحرانیت به روش مونت کارلو بر مبنای روش تکرار چشمه (MCTTRAN) توسعه داده شده است. یکی از مهم ترین مزیت کدهای مونت کارلو، قابلیت تعریف سلول های پیچیده می باشد. ایجاد قابلیت های مختلف در تعریف هندسه می تواند دامنه عملکرد کد را افزایش دهد. یکی از مهم ترین قابلیت های هندسی در کدهای مونت کارلو که امکان استفاده از آنها را در هندسه های پیچیده همانند قلب راکتورهای هسته ای فراهم می سازد، امکان تعریف هندسه های تکرار شونده می باشد. پیچیدگی های پیاده سازی مربوط به این هندسه ها سبب شده است تا کدهای محدودی از این قابلیت بهره مند باشند. استفاده از تکنیک هندسه ترکیبی به همراه قابلیت تعریف ساختارهای تکرار شونده در این کد به همراه قابلیت استفاده از تبدیلات دستگاه های مختصات مختلف و همچنین دارا بودن قابلیت هندسه ی تصادفی، دامنه کاربرد کد MCTTRAN را افزایش داده است، ضمناً استفاده از سطح

مقاطع گروهی و لحاظ نمودن اثرات ناهمسانگردی در سطح مقطع پراکندگی، این کد را به سادگی قابل کاربرد در مسائل بحرانیت گروهی نموده و از اینرو می‌تواند به عنوان یک راستی‌آزمای مناسب برای کدهای یقینی مورد استفاده قرار بگیرد.

برای راستی‌آزمایی و صحت‌سنجی این کد از برخی محک‌های تحلیلی بحرانیت، مسئله آزمون C5G7 و چندین محک دیگر برای بخش‌های مختلف کد استفاده شده است. باید به این نکته توجه داشت که در محاسبات مونت کارلو علاوه بر دقت محاسبات توسط کد، انتخاب تعداد نسل‌های فعال و غیر فعال و همچنین تعداد تاریخچه‌ی هر نسل در دقت نتایج تاثیرگذار است، علاوه بر این محاسبات مونت کارلو بر پایه فرآیندهای تصادفی بوده و جنبه آماری دارد، با این اوصاف نتایج بدست آمده دقت بسیار خوب کد MCTRAN را در محاسبه ضریب تکثیر و همچنین توزیع شار نشان می‌دهد. نتایج نزدیکتر با مرجع با تنظیم پارامترهای مشابه مرجع امکان پذیر می‌باشد (در مرجع این پارامترها دقیقاً ذکر نشده است).

۱۶- مراجع

1. Glasstone, S., George I. B. "Nuclear Reactor Theory", 1970
2. Sobol, I. M. "A Primer for the Monte Carlo Method", 1994
3. Dunn, W.L., Shultis, J.K. "Exploring Monte Carlo methods", Elsevier, 2012
4. Carter, L. L., Cashwell, E. D. "Particle Transport Simulation With Monte Carlo Method", LANL Alamos Scientific Laboratory, 1975
5. Brown, F.B. "A Review Of Best Practices For Monte Carlo Criticality Calculation", LANL, LA-UR-09-05623
6. John, C. W., Everett, L. R., Scott, P. P., John, S. H., "MCNP: Multigroup/Adjoint Capabilities", LA-12704 , 1994
7. "A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 Volume I: Overview and Theory", 2003

8. Sood, A., Forster, R. A., Parsons, D. K., “Analytical Benchmark Test Set for Criticality Code Verification”, 2003 , LA-UR-01-3082
9. Bielajew, A.F., “Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport”, The University of Michigan, 2000
10. BROWN, F.B., “Fundamentals of Monte Carlo Particle Transport”, Lecture notes for Monte Carlo course, LA-UR-05-4983
11. Forrest B. Brown, William R. Martin., “Stochastic geometry capability in MCNP5 for the analysis of particle fuel”, Annals of Nuclear Energy 31 (2004) 2039–2047.
12. Forrest B. Brown, E, William R. Martin, Wei Ji, Jeremy L. Conlin, and John C. Lee, “STOCHASTIC GEOMETRY AND HTGR MODELING WITH MCNP5”, The Monte Carlo Method: Versatility Unbounded In A Dynamic Computing World, American Nuclear Society, LaGrange Park April 17–21, 2005, , IL (2005)

13. X-5 Monte Carlo Team., "MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume II: User's Guide", LA-CP-03-0245, 2003.
14. OECD/NEA Expert Group, "Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenisation, NEA/NSC/DOC(2005)16, 2005.
15. Durkee J. W., "MCNP Geometry Transformation and Plotter Equations", Progress in Nuclear Energy 61(2012)26-40.
16. Kreyszig, E., "Advanced Engineering Mathematics", John Wiley & Sons, 8th Edition, 1999.
17. X-5 Monte Carlo Team. "MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5", Vol.1, LA-UR-03-1987, 2003.
18. Bowser, LL.D., Edward A. "An elementary treatise on analytic geometry", 1905.
19. Paryab, K. "Calculus & analytic geometry", Vol.5, 1990.

20. LASL Group X-6. "Calculation of Cell Volumes and Surface Areas in MCNP", Los Alamos Scientific Laboratory report, LA-8113-MS.
21. Hobson, A.J. "JUST THE MATHS", No.9.6, 2010.
22. Cashwell, D.E., Everett, J.C. "INTERSECTION OF A RAY WITH A SURFACE OF THIRD OR FCURTS DEGREE", LA-4299, 1969.
23. Gradshteyn, I.S., and Ryzhik, I.W. "Table of Integrals, Series, and Products", New York Academic Press, 1980.
24. Carlson, B.C. "SIAM Journal on Mathematical Analysis", vol. 8, pp. 231–242, 1977.
25. Carlson, B.C. "Mathematics of Computation", vol. 49, pp. 595–606, 1987.
26. Davis, Tom. "Practical Calculation of Polygonal Areas ", 2006
27. Ben, Nobel. "Applied Linear Algebra", 1969
28. Kim, Jihan. "Monte Carlo Integration", 2012
29. Henry, Allan F., "Nuclear-Reactor Analysis", 1980

30. Yu-Shen Liu, Jun-Hai Yong, Hui Zhang, Dong-Ming Yan, Jia-Guang Sun. “A quasi-Monte Carlo method for computing areas of point –sampled surfaces”,2005
31. Wood, J., Oliveira, C. D., “A Multigroup Finite Element Solution of the neutron transport equation-1 ”, Ann. Nucl. Energy,1984