دانشگاه گیلان
۷ و ۸ اسفند ماه ۱۳۹۲
رشت – دانشگاه گیلان
بیستمین کنفرانس هسته‌ای ایران
Nuclear society of Iran
20th Iranian Nuclear Conference
26-27 February , 2014
University of Guilan Rasht - Iran

توسعه مبدل ممانهای پراکندگی ناهمسانگرد به بازه‌های هم احتمال و زوایای گسسته

مهدی، زنگیان*؛ عبدالحمید، مینوچهر؛ احمدرضا، ذوالفقاری؛ حیدر علی، کیا
دانشگاه شهید بهشتی-دانشکده مهندسی هسته‌ای-گروه راکتور

چکیده:

یکی از مزایای مهم کدهای ترابرد در نظر گرفتن پراکندگی ناهمسانگرد می‌باشد. در کدهای ترابرد یقینی، سطح مقاطع گروهی ناهمسانگرد بوسیله ضرایب بسط لژاندر توصیف می‌شوند و امکان استفاده مستقیم از این سطح مقاطع در کدهای ترابرد احتمالاتی بدلیل مشکلات نمونه‌برداری وجود ندارد. از آنجائیکه عمدتا کتابخانه‌های سطح مقاطع گروهی برای کدهای یقینی تولید شده‌اند، در این مقاله زیرروالی برای تبدیل ممان‌های ناهمسانگردی به زوایای گسسته بوسیله روش بقای مومنت و بازه‌های هم احتمال بوسیله روش ریشه‌یابی برای استفاده در کدهای ترابرد احتمالاتی توسعه داده شده است. صحت عملکرد این زیرروال با مسائل راستی آزمایی مختلف بررسی شده است.

کلمات کلیدی: *پراکندگی ناهمسانگرد، مونت کارلو، بازه های هم احتمال، زوایای گسسته، مومنت*

۱. مقدمه

سطح مقطع پراکندگی، انرژی و راستای حرکت ذره را پس از پراکندگی مشخص می‌کند و بصورت زیر بیان می‌شود :

$$\sigma_s = \sigma_s(E \to E', \Omega \to \Omega') = \sigma_s(E) \times f(E \to E', \Omega \to \Omega')$$

در حالت گروهی نیز بصورت زیر قابل تفکیک می‌باشد:

$$\sigma_s^{g \to g'}(\mu) = \sigma_{s,0}^{g}\, p_{g \to g'}\, f_{g \to g'}(\mu) \qquad (۱)$$

در این رابطه، $\sigma_{s,0}^{g}$ سطح مقطع پراکندگی کل برای گروه g، $p_{g \to g'}$ احتمال پراکندگی از گروه g به g' و $f_{g \to g'}(\mu)$ تابع توزیع احتمال شرطی پراکندگی به کسینوس زاویه μ می‌باشند.

در کدهای ترابرد یقینی، تابع توزیع احتمال $f_{g \to g'}(\mu)$ عموماً برحسب بسط جملات لژاندر بیان می‌شود:

$$f_{g \to g'}(\mu) = \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} f_{l,g \to g'} P_l(\mu)$$

ضرایب بسط لژاندر ($f_{l,g \to g'}$) به صورت رابطه‌ی زیر تعریف می‌شوند.

$$f_{l,g \to g'} = \frac{\sigma_{s,l}^{g \to g'}}{\sigma_{s,0}^{g \to g'}} \qquad (۲)$$

در شبیه‌سازی مونت کارلو، نیاز به نمونه برداری از تابع توزیع احتمال در حین ترابرد می‌باشد و نمونه‌برداری از تابع توزیع احتمال بیان شده با ضرایب لژاندر پیچیده و عملا غیر قابل استفاده می‌باشد. در این مقاله به روش‌های تبدیل تابع توزیع احتمال به قالب قابل استفاده در کدهای مونت کارلو پرداخته شده و براساس آن زیرروالی برای آن توسعه داده شده است.

۲- روش کار

در کدهای مونت‌کارلو به دلیل نمونه‌برداری برای شبیه‌سازی فیزیکی، توابع توزیع معمولا به شکل بازه‌های هم احتمال، مقادیر گسسته و یا تلفیقی از آن دو مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این بخش روش محاسبه مقادیر گسسته با روش بقای ممان[۲،۳] و همچنین بازه‌های هم احتمال با استفاده از ریشه یابی توصیف شده است.

۲-۱- زیرروال تبدیل تابع توزیع زاویه‌ای به زوایای گسسته

در این روش تابع توزیع احتمال پیوسته که با ضرایب بسط لژاندر محدود (مرتبه N) بیان شده است، با جدول احتمال دیراک (مرتبه $(N+1)/2$) که از زوج‌های (p_i, z_i) تشکیل شده است، جایگزین می‌شود :

$$f(z) \cong \sum_{i=1}^{N} p_i \delta(z - z_i)$$

تابع H توسط رابطه زیر بر حسب تابع توزیع احتمال (f) تعریف می‌شود:

$$H(Z) = \int_{-1}^{1} dz \left(\frac{f(z)}{1 - Z\,z}\right)$$

با استفاده از بسط تیلور، تابع H برحسب مومنت‌های[۱] تابع توزیع احتمال (f) بصورت زیر بیان می‌شود :

$$H(Z) = \int_{-1}^{1} dz \left(1 + Zz + (Zz)^2 + \cdots\right) f(z) = \sum_{l=0}^{2N-1} M_l\, Z^l + O(Z^{2N})$$

که در این رابطه مومنت‌های تابع توزیع احتمال (f) بصورت زیر قابل محاسبه می‌باشد:

$$M_l = \int_{-1}^{1} z^l\, f(z) dz = \sum_{i=1}^{N} p_i\, z_i^l \qquad (۳)$$

با توجه به تعریف تابع H، حفظ (۲N) جمله از این تابع (H) معادل بقای ۲N مومنت اولیه تابع توزیع زاویه‌ای (f) می‌باشد. با استفاده از رابطه (۳) تابع H بصورت زیر قابل بیان است.

$$H(Z) = \sum_{l=0}^{2N-1} M_l\, Z^l = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i}{1 - z_i Z} \qquad (۴)$$

هدف اصلی در این بخش محاسبه زوج‌های (p_i, z_i) می‌باشد، برای این منظور می‌توان از تقریب پید[۲] استفاده کرد. در این روش هر چندجمله‌ای درجه $2N-1$ قابل تخمین با یک کسر، از چند جمله‌ای‌ها با درجه $N-1$ بر چند جمله‌ای با درجه N، می‌باشد .

$$H(z) \cong \sum_{l=0}^{2N-1} M_l z^l = \frac{b_0 + b_1 z + \cdots + b_{N-1} z^{N-1}}{a_0 + a_1 z + \cdots + a_{N-1} z^{N-1} + z^N} = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} b_i z^i}{\sum_{i=0}^{N} a_i z^i} \qquad (۵)$$

با داشتن ریشه‌های چند جمله‌ای مخرج، کسر بالا را می‌توان برحسب مجموع کسرها تفکیک کرد:

---

[۱] Moments

[۲] Pade Approximate

$$H(z) \cong \frac{\sum_{i=0}^{N-1} b_i z^i}{\prod_{i=1}^{N}(z-z_i)} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i}{1-z\,z_i} \qquad (۶)$$

مراحل یافتن (p_i, z_i) در این روش، بصورت زیر قابل بیان است:

- محاسبه مومنت‌های مربوط به تابع توزیع زاویه‌ای :

در این مرحله با توجه به بیان تابع توزیع زاویه‌ای بوسیله ضرایب بسط لژاندر، می‌توان رابطه بازگشتی زیر را برای محاسبه مستقیم مومنت‌ها از این ضرایب بیان کرد :

$$\mu^n = \sum_{l=n,n-2,\cdots} \frac{(2l+1)n!}{2^{(n-l)/2}(\frac{1}{2}(n-l))!(l+n+1)!!} P_l(\mu)$$
$$M_n = \sum_{l=n,n-2,\cdots} \frac{(2l+1)n!}{2^{(n-l)/2}(\frac{1}{2}(n-l))!(l+n+1)!!} f_l \qquad (۷)$$

- محاسبه ضرایب چند جمله‌ای‌های تشکیل دهنده، رابطه (۵)

این ضرایب با توجه به تقریب پید بوسیله دستگاه زیر قابل محاسبه می‌باشد.

$$\sum_{m=0}^{n} M_{n-m} a_m = b_n \qquad (n=0,1,\cdots,N-1)$$
$$\sum_{m=0}^{N} M_{N+n-m} a_m = 0 \qquad (n=0,1,\cdots,N-1)$$

- یافتن ریشه‌های چندجمله‌ای مخرج (z_i)، رابطه (۵)

با محاسبه ضرایب چند جمله‌ای مخرج ریشه این چند جمله‌ای برای درجات پایین بطور مستقیم و برای درجات بالا بوسیله روش نیوتن قابل محاسبه است.

$$a_0 + a_1 z + \cdots + a_{N-1} z^{N-1} + a_N z^N = a_N \prod_{i=1}^{N}(z-z_i)$$

- یافتن وزن‌های مربوط به زوایای گسسته (p_i)، رابطه (۶)

با توجه به روابط مربوط به تقریب پید وزن‌های زوایای گسسته بصورت زیر قابل محاسبه می‌باشند.

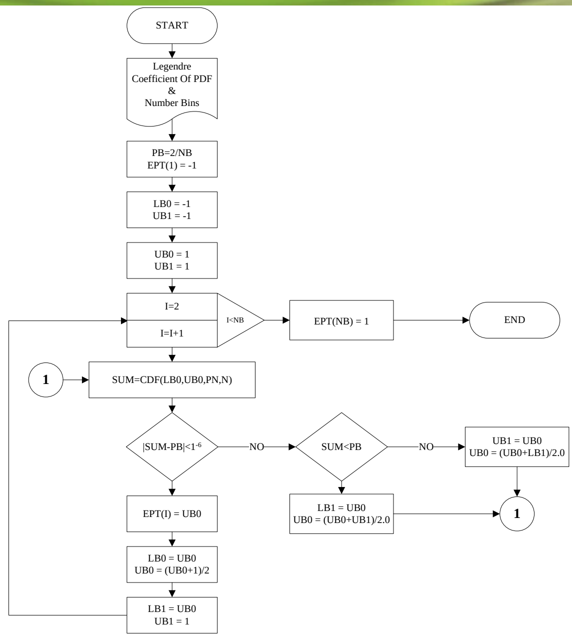
$$c_{n,0} + c_{n,1} z + \cdots + c_{n,(L-1)/2} z^{(L-1)/2} = \prod_{\substack{i=1 \\ i\neq n}}^{N}(z-z_i)$$

$$p_n = \frac{-1^{n-1}}{\prod_{\substack{i=1 \\ i\neq n}}^{N}(z_i-z_n)} \sum_{i=0}^{(L-1)/2} c_{n,i} M_i$$

۲-۲ مبدل تابع توزیع به بازه‌های هم احتمال

در این روش بازه‌های کسینوس زاویه پراکندگی طوری انتخاب می‌شود که احتمال هر بازه برابر $1/N$ (N تعداد بازه‌ها) شود. بنابراین تنها لازم است مقادیر مربوط به محدوده بازه‌ها ذخیره شود. این روش بیان توزیع زاویه‌ای، باعث تسریع نمونه‌برداری در فرآیند مونت کارلو می‌شود و عملا با یک عدد تصادفی بدون نیاز به مقایسه (برخلاف روش مقادیر گسسته) نمونه‌برداری انجام می‌شود[۱].

برای محاسبه بازه های هم احتمال در این مقاله از محاسبه تابع توزیع تجمعی و قسمت کردن آن به مقادیر یکسان استفاده شده است. شکل (۱) روند انجام محاسبات مربوطه را نشان می‌دهد.



شکل (۱) : الگوریتم محاسبه بازه‌های هم احتمال

از آنجائیکه تابع توزیع زاویه‌ای بر حسب ضرایب بسط لژاندر بیان شده است، تابع توزیع تجمعی را می‌توان، بدلیل جمع پذیر بودن انتگرال، برحسب مجموع انتگرال‌های جملات لژاندر بیان کرد.

رابطه زیر، جمله عمومی سازنده جملات لژاندر را نشان می‌دهد.

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

با انتگرال گیری بر روی این رابطه در بازه مورد نظر و کمی ساده سازی رابطه زیر حاصل می‌شود :

$$\int_a^b P_n(x)\,dx = \frac{1}{2^n n!}\int_a^b \frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n\,dx = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2-1)^n\Big]_a^b$$
$$= \frac{1}{2^n n!}\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}\sum_{m=0}^{n}\binom{n}{m}x^{2m}(-1)^{n-m}\Big]_a^b = \frac{1}{2^n n}\sum_{m=1}^{n}\frac{(-1)^{n-m}}{(n-m-1)!\,m!}x^{2m-n}\Big]_a^b \qquad (۸)$$

بنابراین برای محاسبه تابع توزیع تجمعی برای بازه مورد نظر می‌توان ابتدا جملات $b^{2m-1}-a^{2m-1}$ را محاسبه و سپس با توجه به مرتبه لژاندر رابطه (۸) را برای محاسبه تابع توزیع تجمعی بکار برد. این روش حجم محاسبات را کاهش می‌دهد.

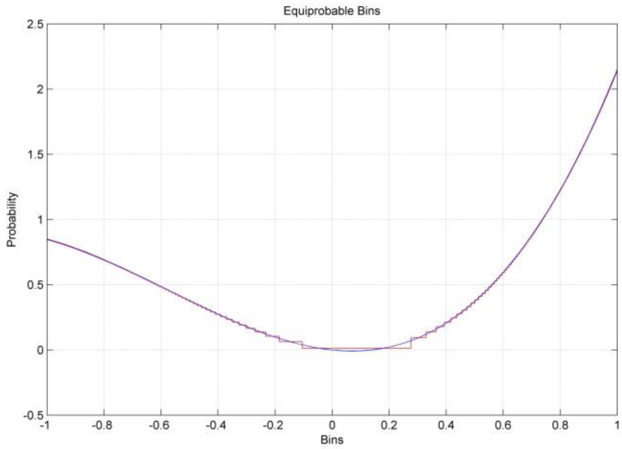
۳- نتایج :

۳-۱- راستی آزمایی اول :

برای بررسی صحت پیاده سازی مبدل، تابع توزیع f که توسط رابطه (۸) بوسیله ضرایب بسط لژاندر تعریف می‌شود، به بازه های هم احتمال و مقادیر گسسته تبدیل و نتایج آن بررسی شده است.

$$f(x) = \frac{1}{2}(1+0.2\times 3\times P_1(x)+0.4\times 5\times P_2(x)+0.1\times 7\times P_3(x)) \qquad (۸)$$

شکل (۲) بازه‌های هم احتمال تولید شده از تابع توزیع زاویه‌ای f، را نشان می‌دهد.



شکل (۲) : بازه‌های هم احتمال تولید شده و تابع توزیع زاویه‌ای رابطه (۸)

زوج‌های (p_i, z_i) نیز که بیانگر زوایای گسسته و احتمال مربوط به آنها می‌باشد، برای تابع توزیع زاویه‌ای f محاسبه و در جدول (۱) آورده شده است.

جدول (۱) : زوایای گسسته و وزن مربوطه

Points	Weights
-۰,۷۳۰۴۳۸۲۹۲۰۲۶۵۲۰	۰,۳۹۲۷۸۵۲۵۱۱۴۰۵۹۴
۰,۸۰۱۸۶۶۸۸۸۹۹۹۹۳۹	۰,۶۰۷۲۱۴۷۴۸۸۵۹۴۰۶

صحت پیاده‌سازی الگوریتم، با بررسی بقای مومنت انجام شده است (جدول (۲)). بدین منظور مومنت‌های دقیق تابع توزیع احتمال (M) با استفاده از ضرایب بسط لژاندر و رابطه (۷) محاسبه، و با مومنت‌ها بدست آمده از زوج‌های (p_i, z_i) (از جدول (۱)) و رابطه (۳) مقایسه شده است (M´). همانطور که مشهود است در این تبدیل ۴ مومنت مربوط به تابع توزیع زاویه‌ای پایسته مانده است.

جدول (۲) : ضرایب بسط لژاندر و مومنت های محاسبه شده

Order	Legendre Coe.	M	M´
۰	۱	۱	۱
۱	۰,۲	۰,۲	۰,۲
۲	۰,۴	۰,۶	۰,۶
۳	۰,۱	۰,۱۶	۰,۱۶

۳-۲- راستی آزمایی دوم :

در این مثال کتابخانه یک گروهی ناهمسانگرد برای کدMCNP با استفاده از اطلاعات جدول (۳)، توسط مبدل تولید شده است[۴]. سپس مقدار ضریب تکثیر برای یک تیغه اورانیومی بحرانی به ضخامت ۱,۵۲۷۵۶ سانتیمتر با بکارگیری این کتابخانه محاسبه، و نتایج آن در جدول (۴) آورده شده است.

جدول (۳) : سطح مقاطع یک گروهی اورانیوم ۲۳۵ با سطح مقاطع پراکندگی ناهمسانگرد مرتبه ۲

υ	Σ_f	Σ_c	Σ_{s0}	Σ_{s1}	Σ_{s2}	Σ_t
۲,۵	۰,۲۶۶۶۶۷	۰,۰	۰,۷۳۳۳۳۳	۰,۲۰	۰,۰۷۵	۱,۰

جدول (۴) : ضریب تکثیر یک تیغه اورانیومی بحرانی بوسیله کتابخانه‌های تولیدی هم احتمال و زوایای گسسته

نوع تبدیل	Multiplication Factor		%Relative Error
	Ref	MCNP	
۳۰ بازه هم احتمال مرتبه ۱ لژاندر	۱,۰۰۰۰۰۰	۱,۰۰۰۰٤۷±۰,۰۰۰۱٥	۰,۰٤۷
۳۰ بازه هم احتمال مرتبه ۲ لژاندر	۱,۰۰۰۰۰۰	۱,۰۰۰۰۰٦±۰,۰۰۰۱٥	۰,۰۰٦
زوایای گسسته مرتبه ۲ لژاندر	۱,۰۰۰۰۰۰	۰,۹۹۷۰۱±۰,۰۰۰۱٥	۰,۲۹۹

۴- بحث و نتیجه گیری

برای تبدیل توابع توزیع با مقادیر منفی که ممکن است با محدود کردن مرتبه بسط ایجاد شود، می‌توان زوایای گسسته را با محدود کردن تعداد مومنت‌ها بدست آورد.

بازه‌های هم‌احتمال تقریب خوبی از نواحی با احتمال زیاد و تقریب ضعیفی از نواحی کم احتمال است. این روش از سرعت بالایی در نمونه‌برداری برخوردار بوده اما دارای دقت کمتری نسبت به روش زوایای گسسته است و ممکن است جزئیات مربوط به تابع توزیع پراکندگی را به خوبی شبیه‌سازی نکند. از ضعف‌های روش زوایای گسسته بروز اثر پرتو[۳] در مرتبه‌های پایین بسط و عدم امکان محاسبه تالی شار نقطه‌ای می‌باشد.

۵- مراجع

۱- X-۵ Monte Carlo Team,"MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version ۵, Volume III: Developer's Guide", Los Alamos, LA-CP-۰۳-۰۲۸۴, ۲۰۰۳

۲- Martin,N., Miss,J. ,Hébert,A. ,"Moment-based probability tables for angular anisotropic scattering", Annals of Nuclear Energy ۳۸, ۲۰۱۱

۳- Pierre Ribon, Mireille Coste-Delclaux, Cédric Jouanne, Cheikh M. Diop,"Angular anisotropy representation by probability tables", International Conference on the Physics of Reactors "Nuclear Power: A Sustainable Resource",۲۰۰۸

۴- Kobayashi,K., Sugimura,N., Nagaya,Y., "۳-D Radiation Transport Benchmark Problems and Results for Simple Geometries with Void Regions", OECD/NEA (۲۰۰۰).

[۳] Ray effect