

توسعه زیرروال محاسبه شار در کد MCNP با استفاده از روش تخمین گر چگالی احتمال Kernel Density

زهرا، رجب پور نیک فام؛ عبدالحمید، مینوچهر؛ مهدی، زنگیان؛ حیدرعلی، کیا

دانشگاه شهید بهشتی-دانشکده مهندسی هسته‌ای-گروه راکتور

چکیده:

کد محاسباتی MCNP به عنوان یکی از ابزارهای قدرتمند در محاسبات هسته‌ای بشمار می‌آید. در این کد برای ثبت وقایع از شمارشگرها (تالی‌ها) بصورت تابع توزیع هیستوگرامی استفاده می‌شود که این امر منجر به بروز مشکلاتی می‌گردد. پیاده‌سازی و به کارگیری یک تابع تخمین گر چگالی احتمال غیرپارامتری با عنوان Kernel Density Estimator می‌تواند به عنوان یک راه حل مناسب جهت رفع مشکلات مورد توجه قرار گیرد. در این مقاله یک تابع چگالی احتمال مناسب معرفی و سپس زیرروال مربوط به آن برای تخمین شار با استفاده از زیرروال TALLYX در کد MCNP، طراحی و پیاده‌سازی می‌گردد. در پایان نتایج حاصله با نتایج محاسبه شار به روش هیستوگرامی در کد MCNP مقایسه می‌گردد.

کلیدواژه: مونت کارلو، تخمین گر شار، تابع چگالی احتمال غیرپارامتری، Kernel Density Estimator

مقدمه:

به طور کلی چهار روش متفاوت برای ثبت وقایع در شمارشگرهای یک کد مونت کارلو وجود دارد که شامل تخمین گر برخورد، تخمین گر طول پیمایش، تخمین گر جذب و تخمین گر رویداد بعدی می‌باشد. روش متداول برای ثبت وقایع در کدهای مونت کارلو استفاده از تخمین گر طول پیمایش با استفاده از تابع چگالی هیستوگرامی است. برای ساخت یک هیستوگرام، متغیرهای فضای فاز به تعداد معینی بازه تقسیم‌بندی می‌شوند و کمیت‌های مورد بررسی در شبیه‌سازی در هر یک از این بازه‌ها تخمین زده می‌شود. این روش یک تقریب ناپیوسته برای توزیع‌های واقعی را موجب می‌شود و میزان دقت آن به تعداد بازه‌ها بستگی دارد. از طرفی با افزایش تعداد بازه‌ها، واریانس در هر بازه افزایش می‌یابد که از اشکالات این روش بشمار می‌آید. یکی دیگر از اشکالات این روش وابستگی تابع چگالی تخمین زده شده به انتخاب مبدا می‌باشد. برای رفع مشکلات مذکور استفاده از توابع توزیع چگالی مختلف بجای تابع هیستوگرامی پیشنهاد شده اند که با عنوان تخمین گر کرنل تابع چگالی^۱ شناخته می‌شود [۱]. باتوجه به قابلیت روش KDE در ثبت شار و همچنین قابلیت کد MCNP، در این مقاله محاسبه شمارشگر شار بر مبنای تخمین گر طول پیمایش ذره با استفاده از روش KDE بررسی و پیاده‌سازی شده است.

^۱ Kernel Density Estimator

روش کار:

اگر N مشاهده حقیقی X_1, \dots, X_N (مستقل و با توزیع یکسان) که دارای تابع توزیع $f(x)$ و وزنی متناظر با w_1, \dots, w_N می‌باشند، را مد نظر قرار دهیم، آن‌گاه تخمین گر KDE برای تابع f به صورت زیر تعریف می‌شود [۱]:

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{\sum_{i=1}^N w_i} \sum_{i=1}^N w_i \frac{1}{h} k\left(\frac{x - X_i}{h}\right) \quad (1)$$

در رابطه‌ی فوق $\hat{f}(x)$ تخمینی برای $f(x)$ ، h طول باندها یا پارامتر هموارکننده و k تابع کرنل است.

• تعیین طول باندها

یکی از پارامترهای مهم در روش KDE طول باندها می‌باشد. در تعیین طول باندها دو کمیت بایاس و واریانس دارای اهمیت هستند. اگر بخواهیم مقدار بایاس را کاهش دهیم، باید مقدار h کوچکی انتخاب کنیم و این در حالی است که مقدار کوچک h منجر به بزرگ شدن مقدار واریانس می‌گردد. از سوی دیگر انتخاب h بزرگ نیز منجر به تولید بایاس سیستماتیک در تخمین می‌گردد، به عبارت دیگر انتخاب پارامتر h باید با سبک و سنگین نمودن خطاهای تصادفی و سیستماتیک صورت گیرد. یکی از راه‌های محاسبه h بهینه، کمینه کردن مقدار کمیت $MISE^2$ است. این کمیت برای $\hat{f}(x)$ تعریف شده به صورت زیر است:

$$MISE(\hat{f}) = \frac{1}{4} h^4 k^2 \int f''(x)^2 dx + \frac{1}{Nh} \int k(z)^2 dz \quad (2)$$

بدین ترتیب مقدار بهینه h به صورت زیر محاسبه خواهد شد:

$$h_{opt} = \frac{\{\int k(z)^2 dz\}^{1/5}}{k^{1/5} \{\int f''(x)^2 dx\}^{1/5}} N^{-1/5} \quad (3)$$

با در نظر گرفتن یکی از انواع توزیع‌های استاندارد مانند توزیع گوس برای $f(x)$ ، مقدار h_{opt} تعیین می‌گردد:

$$h_{opt} = 1.06\sigma N^{-1/5} \quad (4)$$

پارامتر σ ، انحراف معیار داده‌ها می‌باشد.

• توابع توزیع چگالی

توابع توزیع چگالی نیز با توجه به رابطه‌ی (۲) و کمینه شدن مقدار $MISE$ تعیین می‌گردند. بر این اساس توابع مختلفی در مراجع مطرح شده‌اند [۱]. انتخاب تابع توزیع چگالی مناسب با توجه به راندمان تابع و هزینه‌های

^۲ Mean Integrated Square Error

محاسباتی صورت می‌گیرد. در اغلب مسائل MCNP تابع Epanechnikov که در رابطه‌ی (۵) بیان شده است به عنوان تابع توزیع چگالی مناسب بوده و استفاده از آن توصیه شده است [۱].

$$k_e(x) = \begin{cases} \frac{3}{4\sqrt{5}} \left(1 - \frac{x^2}{5}\right) & |x| \leq \sqrt{5} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

• تصحیح تابع توزیع چگالی در مرزها

عملکرد تخمین‌گر چگالی $\hat{f}(x)$ در نزدیکی مرزها ضعیف است. این امر به دلیل آن است که مقدار بایاس $\hat{f}(x)$ در نزدیکی مرزها همانند نقاط درونی از مرتبه $O(h^2)$ نمی‌باشد. روش‌های مختلفی برای تصحیح تابع توزیع چگالی در مرزها مطرح شده است. در این مقاله تصحیح زیر برای تابع توزیع چگالی در مرز به کار رفته است [۱ و ۲].

$$k_b(u) = \frac{\{a_r(p) - a_l(p)u\}k(u)}{a_r(p)a_r(p) - a_l(p)^2} \quad (6)$$

مقادیر a_i ها و p با توجه به مرزها و شرایط آن‌ها تعیین می‌شود.

• تعیین رابطه شار بر مبنای طول پیمایش با استفاده از KDE

شکل ریاضی شمارشگر شار بر مبنای طول پیمایش در کد MCNP به صورت زیر است:

$$\hat{\phi} = \frac{1}{NV} \sum_{i=1}^N \sum_{c=1}^{c_i} w_{i,c} d_{i,c} \quad (7)$$

با استفاده از مفهوم طول پیمایش و رابطه‌ی (۱) برای تابع توزیع چگالی، شمارشگر شار به صورت رابطه (۸) قابل بیان است:

$$\hat{\phi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{c=1}^{c_i} \frac{w_{i,c} d_{i,c}}{n} \sum_{j=1}^n \frac{1}{h} k\left(\frac{x - X_{i,c,j}}{h}\right) \quad (8)$$

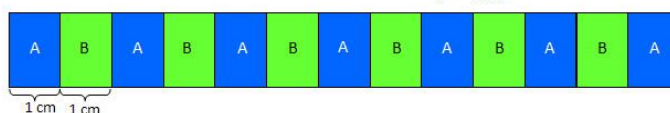
در روابط مطرح شده، N تعداد تاریخچه‌های مورد بررسی، c_i تعداد رویدادهای متعلق به تاریخچه i ام، $d_{i,c}$ طول پیمایش بین دو رویداد $c-1$ و c ، و $w_{i,c}$ نیز وزن ذره بین این دو رویداد می‌باشد. جهت انجام محاسبات، در هر پیمایش ذره بین دو رویداد، $(d_{i,c})$ به n قسمت مساوی تقسیم شده و سپس $X_{i,c,j}$ ها به صورت تصادفی در هر یک از این قسمت‌ها انتخاب و ذخیره می‌گردد. در هر سیکل با استفاده از این داده‌ها مقدار h بر اساس رابطه‌ی (۴) محاسبه می‌گردد، سپس با جایگذاری این مقدار و تابع توزیع چگالی در رابطه (۸)، مقدار شار در هر نقطه‌ی دلخواه محاسبه می‌شود.



نتایج :

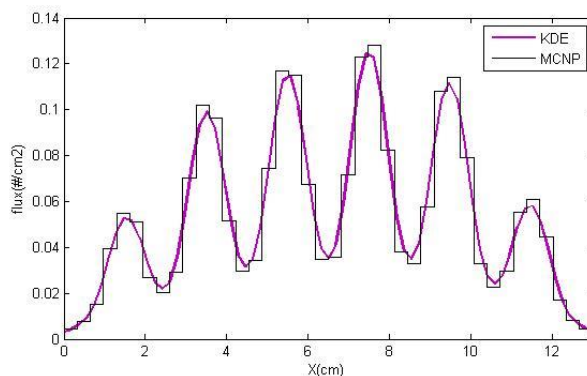
با توجه به مطالب ذکر شده، زیرروال تخمین گر KDE، در زیرروال tallyx کد MCNP طراحی و پیاده سازی شده است. به منظور بررسی نتایج حاصل از این مقاله، محاسبه توزیع شار برای دو محیط زیر مورد بررسی قرار گرفته و سپس نتایج به دست آمده با نتایج کد MCNP مقایسه شده است. شبیه سازی مثال های زیر در کد MCNP با در نظر گرفتن ۲۰۰ سیکل، ۱۰۰ سیکل غیرفعال و تعداد ۳۰۰۰۰ تاریخچه در هر سیکل صورت گرفته است.

$$A: \begin{cases} \Sigma_t = 0.32640 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_s = 0.29376 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_a = 0.03264 \text{ cm}^{-1} \end{cases}, \quad B: \begin{cases} \Sigma_t = 0.32640 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_s = 0.248064 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_f = 0.065280 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_f = 0.013056 \text{ cm}^{-1} \\ \nu = 2.70 \end{cases}$$



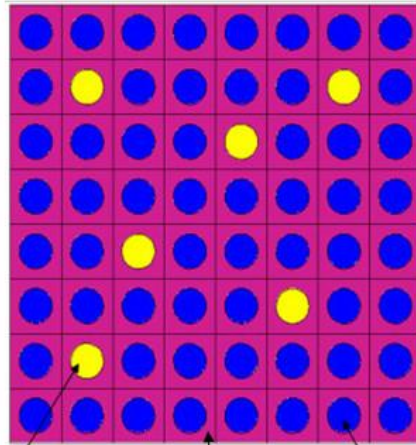
شکل ۱: محیط یک بعدی در نظر گرفته شده برای شبیه سازی

نتایج حاصل از کد MCNP و برنامه طراحی شده در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲: توزیع شار محاسبه شده توسط روش KDE طراحی شده و کد MCNP در یک بعد

به عنوان مثال دوم یک محیط دو بعدی به صورت زیر مورد بررسی قرار می گیرد:

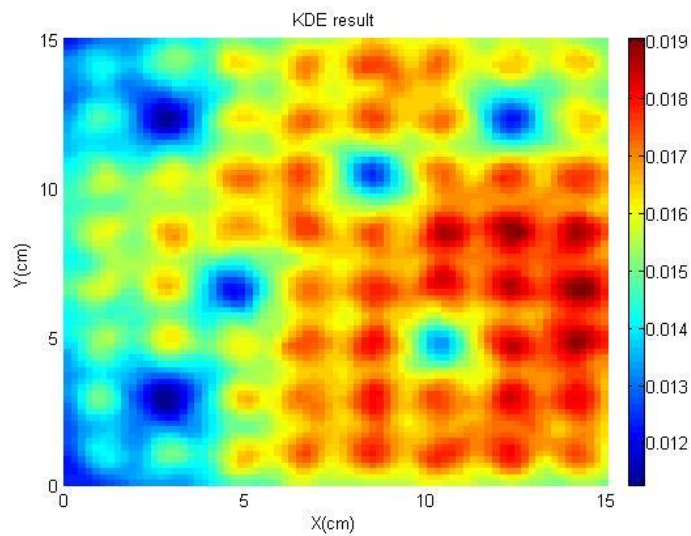


$$\begin{array}{l}
 C: \begin{cases} \Sigma_t = 0.32640 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_a = 0.29376 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_s = 0.03264 \text{ cm}^{-1} \end{cases}
 \end{array}$$

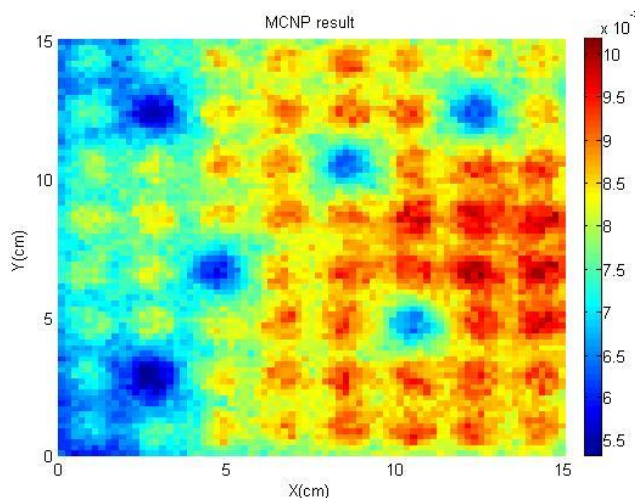
$$A: \begin{cases} \Sigma_t = 0.32640 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_s = 0.03264 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_a = 0.29376 \text{ cm}^{-1} \end{cases}$$

$$B: \begin{cases} \Sigma_t = 0.32640 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_s = 0.248064 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_f = 0.065280 \text{ cm}^{-1} \\ \Sigma_f = 0.013056 \text{ cm}^{-1} \\ \nu = 2.70 \end{cases}$$

شکل ۳: محیط دو بعدی در نظر گرفته شده برای شبیه‌سازی



شکل ۴: توزیع شار محاسبه شده توسط روش KDE طراحی شده



شکل ۴: توزیع شار محاسبه شده توسط کد MCNP

شکل‌های (۳) و (۴)، توزیع شار محاسبه شده روش KDE و روش متداول استفاده شده در کد MCNP را با اجراهای یکسان نشان می‌دهد. همانطور که از این شکل‌ها مشهود است، روش KDE نتایج بهتری را از شکل شار در سیستم تخمین می‌زند.

بحث و نتیجه‌گیری:

استفاده از روش KDE در محاسبه شار منجر به نتایجی با دقت بالاتری نسبت به روش‌های متداول مبتنی بر تابع توزیع هیستوگرامی می‌شود. با استفاده از این روش می‌توان به یک توزیع مناسب برای تابع مد نظر (شار) دست یافت به گونه‌ای که می‌توان مقدار آن را در هر نقطه دلخواه تخمین زد. علاوه بر این، مشکلات و محدودیت‌های مربوط به روش هیستوگرام نیز با استفاده از این روش از بین می‌رود. عدم نیاز به تقسیم‌بندی محیط مورد بررسی به قسمت‌های کوچکتر (bin بندی) و همچنین عدم نیاز به محاسبه حجم سلول در محاسبات شار از مزایای دیگر روش KDE است.

مراجع:

1. Kaushik Banerjee, "KERNEL DENSITY ESTIMATOR METHODS FOR MONTE CARLO RADIATION TRANSPORT", Nuclear Engineering and Radiological Sciences in The University of Michigan, Page: ۱-۷۲, ۲۰۱۰
2. M. C. Jones and P. J. Foster, "A SIMPLE NONNEGATIVE BOUNDARY CORRECTION METHOD FOR KERNEL DENSITY ESTIMATION" Statistica Sinica ۶, Page: ۱۰۰۵-۱۰۱۳, ۱۹۹۶
3. X-۵ Monte Carlo Team. "MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version ۵", Vol. ۱, LA-UR-۰۳-۱۹۸۷, ۲۰۰۳.