



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

TDK DOLGOZAT

**Monte-Carlo szabadúthossz-szóráscsökkentési eljárás
fejlesztése szabadúthossz-torzítás és fürkészminták
alkalmazásával**

Tóth Boglárka

Témavezető: Dr Légrády Dávid
Egyetemi docens
BME Nukleáris Technikai Intézet
Nukleáris Technika Tanszék

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
2018

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés, motiváció	3
2. A dolgozat elméleti alapjai	4
2.1. Szórás	4
2.2. FOM	5
2.3. VOV	5
2.4. Integrálás Monte-Carlo-módszerrel [4]	6
2.4.1. Mintavételezés	7
2.4.2. Nem analóg mintavételezés	7
3. Részecsketranszport	10
3.1. Woodcock-módszer	10
3.2. Nem analóg Woodcock-módszer [5]	11
3.3. A szabad úthossz torzítása [2]:	12
4. 2D-s geometriában történő vizsgálatok	14
4.1. Az irányfüggő adjungált felosztása	14
4.2. Irányfüggő adjungált közelítése fürkészmintákkal	18
4.2.1. Vizsgálat külső pontból induló részecskékkel	20
4.2.2. Vizsgálat belső pontból induló részecskékkel	22
5. Összefoglalás, konklúziók	24

Absztrakt

A Monte-Carlo részecsketranszport módszerek hatékonyságának növelése elméletet tekintve kidolgozott rendszer, az adjungált avagy részecske-értékesség függvény felhasználásával elviekben akár u.n. nulla szórású, azaz egyetlen Monte-Carlo mintából torzítatlan becslést adó számolást is véghez lehetne vinni. A Nukleáris Technikai Intézetben fejlesztett GUARDYAN elnevezésű, grafikus kártyákon futó szoftver szóráscsökkentési eljárásai között megtalálható a részecsketranszport szabadúthossz-sorsolását kedvezően torzító módszer, melynek hatékonyságnövelő hatását az elmélet szerint fokozni lehetne a kölcsönhatások iránytorzításának kedvező mintavételezésével. Az iránytorzítás kedvező mintavételezését a gyakorlatba átültetni csak nagyon egyszerű esetekben lehet, a jelenlegi általános célú MC kódokban iránytorzítás lehetőség nem szerepel. A neutron szórás kölcsönhatásinak kedvező adjungált alapú torzított mintavételezése megvalósítható fürkészmintákkal, melyek értékessége alapján sorsoljuk ki a végleges mintát. Munkám során tesztelem a fürkészminták számának hatását a szórásnyereségre összehasonlítva a direkt adjungált-alapú mintavételezéssel izotróp szórás esetére, majd kombinálva a szabadúthossz-sorsolás kedvező torzításával érdemben különböző 2D geometriákon

1. Bevezetés, motiváció

Monte-Carlo szimulációk nagyon fontos jellemzője, hogy az eredménynek mekkora a szórása. Mivel a módszert alkalmazzák például nukleáris számítások, szimulációk elvégzésére, az eredmény pontossága, megbízhatósága–melyekre egy jó mérőszám a szórás– kardinális kérdés. Dolgozatomban a fürkészmintákkal történő szórás csökkentés módszerének alkalmazhatósági határait vizsgálom a szabadúthossz-sorsolás torzításával kombinálva egy reaktor aktív zónáját leegyszerűsítve modellező geometriában. TDK dolgozatom célja olyan paramétertartományokat illetve további kutatási irányokat találni, amelyek beépíthetők lesznek komolyabb összetettebb szimulációkba úgy, hogy azok eredményét javítani tudja.

Az absztraktban szereplő GPU alapú reaktordinamikai kód, a GUARDYAN fejlesztési körébe illeszkedik a dolgozat, ezért a szórás csökkentési eljárások tulajdonságait e kód szempontjából is vizsgálom.

Világviszonylatban a Monte-Carlo alapú reaktordinamikai kódok lassan elhagyják a felderítési szakaszt, és elkezdik a koncepció igazolását közelebb hozni az ipari alkalmazásokhoz. Az McSAFE projekt része például, hogy dinamikusá tegyen olyan világszerte használt Monte-Carlo kódokat, mint a Serpent2 vagy a TRIPOLI-4 [6].

A GUARDYAN fejlesztése a témát az erősen párhuzamos számítógép architektúrán– mint például a General Purpose GPU– keresztül közelíti meg. A GPU-k nemrég bejelentett akár 24GB-os memóriakapacitása utat nyit az ipari alkalmazások felé, a GPU-val végrehajtott implementációtól egy azonos árú CPU-val megvalósíthatóhoz képest legalább ötszörös gyorsaságot remélnék. A GUARDYAN fejlesztése 2015-ben kezdődött, és a projekt 2019-es végekor várhatóan képes lesz teljes fizikai modellezésre, tud majd termikus visszacsatolás nélküli kinetikus számításokat és kezdetleges visszacsatolással rendelkező termohidraulikai modellezést végezni. [3] TDK dolgozatomban GUARDYAN és általánosságban a neutronfizikai modellezés sajátosságait veszem figyelembe a fürkészminták használatával.

2. A dolgozat elméleti alapjai

2.1. Szórás

A TDK dolgozat jelentős része a szórás fogalmkörére épül, a cél a lehető legnagyobb mértékben csökkenteni a szórást. A szórás fogalmkörén belül két definícióra érdemes kitérni.

1. A szórásnégyzet:

$$\mathbb{D}^2(X) = \mathbb{E}(X^2) - (\mathbb{E}(X))^2, \quad (1)$$

ahol $\mathbb{E}(X)$ az X valószínűségi változó várható értéke.

Mintaátlag szórásnégyzete:

Ha N db független x_i mintánk van, melyek azonos eloszlásból kerültek ki: Az \bar{x} mintaátlag megkapható a következő összefüggéssel: $\bar{x} = \frac{\sum x_i}{N}$, a mintaátlag szórásnégyzete $\mathbb{D}^2\left(\frac{\sum x_i}{N}\right)$, amely a várható érték linearitásából és a minták függetlenségéből következően[4]:

$$\begin{aligned} \mathbb{D}^2\left(\frac{\sum x_i}{N}\right) &= \mathbb{E}\left(\frac{\sum x_i}{N}\right)^2 - \left[\mathbb{E}\left(\frac{\sum x_i}{N}\right)\right]^2 = \\ &= \frac{1}{N^2} \left(\mathbb{E}\left(\sum x_i^2\right) - \left[\mathbb{E}\left(\sum x_i\right)\right]^2\right) = \\ &= \frac{1}{N^2} (N\mathbb{E}(x_i^2) - N[\mathbb{E}(x_i)]^2) = \frac{1}{N}\mathbb{D}^2(x_i) \end{aligned} \quad (2)$$

Mintaátlag szórásnégyzetének becslése:

$$\mathbb{D}^2\left(\frac{\sum x_i}{N}\right) \cong \frac{N-1}{N^2} \left(\frac{\sum x_i}{N} - \left[\frac{\sum x_i^2}{N}\right]^2\right) \quad (3)$$

2. A relatív szórásnégyzet:

$$RSD^2 = \frac{\mathbb{D}^2(X)}{(\mathbb{E}(X))^2} \quad (4)$$

Mintaátlag relatív szórásnégyzetének becslése:

$$RSD^2 \cong \frac{\frac{1}{N} \frac{N-1}{N} \left(\frac{\sum x_i}{N} - \left[\frac{\sum x_i^2}{N}\right]^2\right)}{\left[\frac{\sum x_i}{N}\right]^2}. \quad (5)$$

A fent található $\frac{N-1}{N}$ -es szorzó nagy N -ek esetén egy nagyon kis mértékű korrekció, melyet a Monte-Carlo számítások során el szoktak hagyni, a továbbiakban én is így teszek. Egyszerű a szemléltetése a relatív szórásnégyzet becslésének, ha x_i indikátorváltozó: $x_i = 1$, ha teljesít valamilyen feltételt (például a részecske detektálódott), egyébként $x_i = 0$. Legyen N db minta, ebből M db detektált! A fenti módszerrel becsült relatív szórásnégyzet:

$$RSD^2 = \frac{\sum x_i^2}{(\sum x_i)^2} - \frac{1}{N} = \frac{1}{M} - \frac{1}{N}. \quad (6)$$

2.2. FOM

A Monte-Carlo szimulációk szórás melletti másik fontos jellemzője a FOM (Figure Of Merit, magyarul jósági tényező). Azt mondja meg, mennyire hatékony a szimuláció. A 7. *egyenlettel* definiáljuk:

$$FOM = \frac{1}{RSD^2 \cdot t}, \quad (7)$$

ahol RSD^2 a relatív szórásnégyzet, t pedig a szimuláció futásideje. Két szimuláció közül az a jobb, amelyik azonos futásidő alatt kisebb szórású eredményt ad, ami azt jelenti, hogy az a jobb, amelyiknek nagyobb a FOM -ja. Mivel a szimuláció futásideje arányos a mintaszámmal: $t \sim N$, a relatív szórásnégyzet pedig a mintaszám reciprokával: $RSD^2 \sim \frac{1}{N}$, a futásidő és a szórásnégyzet szorzata egy konstans érték. Ebből következően a szorzat reciproka, tehát a FOM is egy konstans érték, amely független a mintaszámtól.

A FOM nagyon fontos mérőszáma a Monte-Carlo szimulációknak, jelen dolgozatban viszont több szó nem esik róla, mert a saját eszközön, *MATLABTM* környezetben végzett szimulációk időméjének mérése és egy másik gép másik környezetében végzett időmérések összegeztetése nehézkes.

2.3. VOV

Szimulációknál fontos, hogy minél többféle módon ellenőrizhessük a szimuláció eredményét. A szórás mellett még egy ilyen statisztikai jellemző a VOV (Variance of Variance): ez a mérőszám a szórás szórására ad becslést. Arról ad tájékoztatást, hogy az RSD értéke mennyire stabil, ebből következően pedig a szimuláció eredményének stabilitására következtethetünk. Elmondható, hogy minél nagyobb a VOV értéke, annál instabilabb az eredmény. Kiszámítása [1]:

$$VOV = \frac{\sum x_i^4 - 4 \sum x_i \sum x_i^3 / N + 6 \sum x_i^2 (\sum x_i)^2 / N^2 - 3 (\sum x_i)^4 / N^3}{(\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2 / N)^2} - \frac{1}{N} \quad (8)$$

vagy pedig:

$$VOV = \frac{\sum x_i^4 - 4 \sum x_i \sum x_i^3 / N + 8 \sum x_i^2 (\sum x_i)^2 / N^2 - 4 (\sum x_i)^4 / N^3 - (\sum x_i^2)^2 / N}{(\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2 / N)^2} \quad (9)$$

2.4. Integrálás Monte-Carlo-módszerrel [4]

Tekintsük a Monte-Carlo integrálásnak azt a modelljét, mikor az integrálandó $\varphi(x)$ függvényt két függvény szorzataként ($\varphi(x) = f(x)g(x)$) is fel tudunk írni, a továbbiakban én is ezt fogom használni. Ebben az esetben $f(x)$ egy PDF, tehát

1. $f(x) \geq 0$
2. $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) = 1,$

$g(x)$ -et nevezhetjük detektorfüggvénynek.

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x) dx \quad (10)$$

Az az állítás, hogy ha N db független x_i mintát veszünk $f(x)$ -ből, akkor az integrál értéke (I) közelítőleg

$$I \approx \frac{\sum_{i=1}^N g(x_i)}{N} \quad (11)$$

Bizonyítás:

$$\mathbb{E} \left(\frac{\sum_{i=1}^N g(x_i)}{N} \right) = \frac{1}{N} N \mathbb{E}(g(x_i)) = \mathbb{E}(g(x_i)) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx = I, \quad (12)$$

$\mathbb{E}(X)$ az X valószínűségi változó várható értéke; $g(x)$ a későbbiekben detektorfüggvény néven kerül említésre, és a detektor karakterisztikája szerint súlyozza $f(x)$ -et. A legegyszerűbb esetben $g(x)$ indikátorfüggvény, tehát $g(x) = 1$, ha x_i a detektor geometriáján belül van, és $g(x) = 0$ egyébként.

2.4.1. Mintavételezés

Legyen $f(x)$ egy PDF (Probability Density Function, valószínűség-sűrűség függvény)! Az (13) összefüggések szerint kapott x értékek $f(x)dx$ gyakorisággal esnek $[x, x + dx]$ tartományba, azaz ha r_i ($i=1..N$) értékek független véletlen számok, akkor az $x_i = P^{-1}(r_i)$ értékek független minták az $f(x)$ függvényből.

$$\begin{aligned} r &= P(x) = \int_a^x f(x')dx' \\ x &= P^{-1}(r) \end{aligned} \quad (13)$$

Ezt nevezik inverz kumulatív módszernek [4].

2.4.2. Nem analóg mintavételezés

Vannak olyan esetek, mikor nehéz megoldani a mintavételezést $f(x)$ -ből, erre egy megoldás a nem analóg mintavételezés: egy új, könnyebben mintavételezhető PDF-et $[f'(x)]$ vezetünk be. Ezzel meg is szorozzuk, és el is osztjuk az integrandust, tehát végső soron nem változtattuk meg azt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f'(x) \frac{f(x)g(x)}{f'(x)} dx. \quad (14)$$

Így

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)g(x_i)}{f'(x_i)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i g(x_i), \quad (15)$$

ahol bevezetésre került w_i , amit az egyes hozzájárulások súlyaként értelmezzünk. A bizonyítás visszavezethető az analóg esetről látott módszerre.

Nulla szórású Monte-Carlo integrálás Nulla szórású MC integrálás elérésének feltétele, hogy

$$RSD^2 = \frac{\sum g(x_i)^2}{(\sum g(x_i))^2} - \frac{1}{N} = 0 \quad (16)$$

legyen. Az állítás az, hogy ez elérhető, ha ismerjük $f(x)$ -et és $g(x)$ -et is. Ha ekkor a mintavételező függvényt

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x)g(x)}{I}, \\ I &= \int f(x)g(x)dx \end{aligned} \quad (17)$$

-nek választjuk, a Monte-Carlo integrálás eredményének szórása 0 lesz:

$$RSD^2 = \frac{\sum \left(\frac{f(x_i)}{\frac{f(x_i)g(x_i)}{I}} g(x_i) \right)^2}{\left(\sum \frac{f(x_i)}{\frac{f(x_i)g(x_i)}{I}} g(x_i) \right)^2} - \frac{1}{N} = \frac{NI^2}{N^2I^2} - \frac{1}{N} = 0. \quad (18)$$

Hátránya, hogy valós problémák esetén f , g , vagy $f \cdot g$ függvények zárt alakban sokszor nem ismertek. Ha azonban f -t és g -t lehetőség van valamilyen formában közelítőleg megadni, úgy a fenti módszer ötletén alapuló algoritmusokkal a végzett szimuláció szórása csökkenthető.

Felmerülő problémák a nulla szórást közelítő szimulációkkal kapcsolatban Az egyik akadályozója a nulla szórású szimuláció kivitelezésének, mikor f , g , vagy $f \cdot g$ függvények zárt alakban, vagy egyáltalán semmilyen formában nem ismertek, vagy a szorzatukban csak numerikusan mintavételezhetően ismertek, emiatt a mintavételezés nem megoldható. A valóságban az is igen gyakori eset, hogy f , g függvények igen bonyolult, fizikai törvényeken alapuló mintavételező függvények, melyek egyszerre több változótól is függenek; ha részecsketranszportra gondolunk, akkor például a részecske energiájától, az ütközés szögétől, a részecske típusától, stb. [4]. Sokszor ezek a többdimenziós eloszlások csak táblázatos alakban állnak rendelkezésünkre, és hely- illetve irányfüggő, vagy mindkettőtől egyszerre függő adjungált függvény esetén minden kölcsönhatásnál az adott irány szerint újra ki kell integrálni a függvényeket. Ez a lépés azonban a függvények bonyolódásával oly mértékben növekvő számítási kapacitást igényel, hogy nagyon hamar kikerül a megoldható problémák köréből.

Felmerülhet továbbá az is, hogy az adjungált eleve diszkrét közelítésben van megadva, ami egyből kizárja a nulla szórású szimuláció elméleti szintű megvalósítását is.

Ezekre a problémákra kínál közelítő megoldást a reakciósorsoláshoz fürkészmintákat felhasználó szimuláció.

Nem analóg mintavételezés fürkészminták segítségével A fürkészminták használata egy nulla szórású integrált közelítő módszer. Fürkészminták segítségével nem kell bonyolult eloszlásfüggvényeket invertálva mintavételeznünk. Ehelyett egy egyszerű eloszlásból vett ún. fürkészmintákkal "feltérképezzük" a bonyolult eloszlást, majd a fürkészmintákból alkotott diszkrét eloszlásból választjuk ki a végső mintát.

A mintavételező folyamat:

Az integrált N db w_i mintából számoljuk ki (11) egyenlet alapján. Minden w_i mintát alminták közül sorsolunk ki: az integrandus PDF tagjából például inverz

kumulatív módszerrel m db x_i^a fürkészmintát (almintát) veszünk. Ezeket behelyettesítve az integrandus detektorfüggvény részébe megkapjuk a $g(x_i^a)$ értékeket. Ezeket normálással egy diszkrét eloszlásfüggvénnyé transzformáljuk:

$$p_i = \frac{g(x_i^a)}{\sum_{i=1}^m g(x_i^a)}$$

$$\sum_{i=1}^m p_i = 1$$

A fenti eloszlásból aztán egy 0 és 1 közé eső véletlenszámmal választjuk ki a p_i valószínűséghez tartozó $g(x_i^a)$ fürkészmintát, mely egy lesz az integrál kiszámításához felhasznált N db $g(x_i^a)$ mintából.

A kiválasztással együtt súlykorrekciót is kell alkalmaznunk:

$$w_i = w \cdot \frac{1}{p_i \cdot m}, \quad (19)$$

ahol w a részecske kezdeti súlya.

Az egy minta előállításához felhasznált fürkészminták számának növelésével egyre inkább megközelítjük az elméleti 0 szórású integrálhoz szükséges adjungált alapú mintavételezést. Ezt szemléltettem a *1. ábrán*.

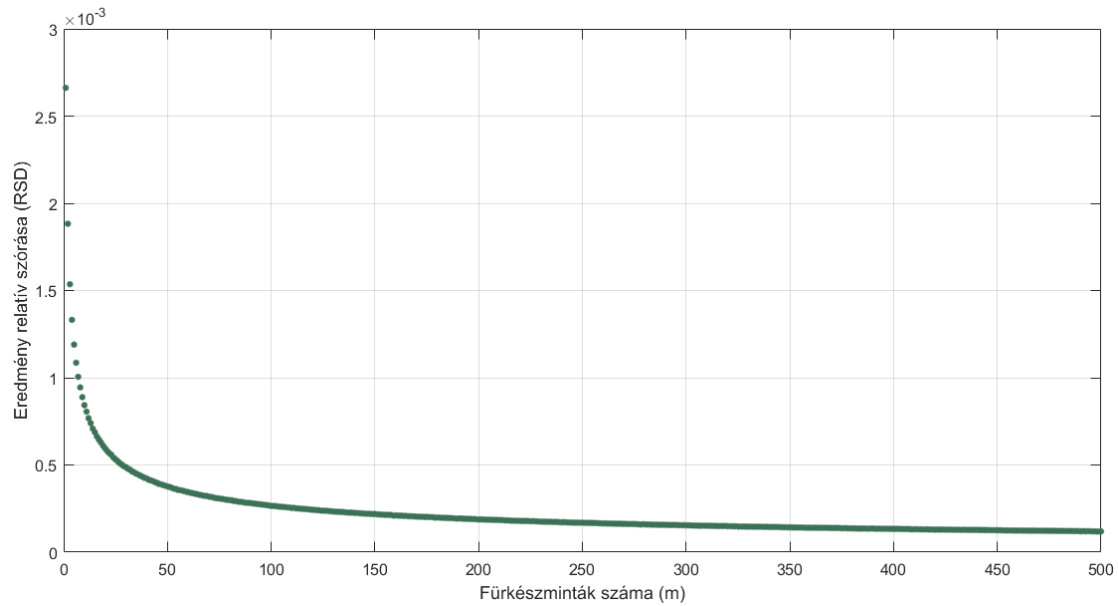
Fürkészmintákkal történő integrálás szemléltetése A kiszámítandó integrál:

$$I = \int_0^a \Sigma e^{-\Sigma x} \cdot x dx, \quad (20)$$

a paraméterek $a = 1$, $\Sigma = 0.3$ értékei mellett. Az integrál becsléséhez $N = 100000$ mintát használtam. Az x_i^a fürkészmintákat inverz kumulatív módszerrel vettem $f(x) = \Sigma e^{-\Sigma x}$ -ből, a detektorfüggvény $g(x) = x$:

$$x_i^a = -\frac{\ln(1 - Q \cdot r)}{\Sigma}, \quad (21)$$

ahol $Q = \int_0^a f(x) dx$. A *1. ábrán* a (20) integrál közelítő eredményének relatív szórását ábrázoltam a minták előállításához felhasznált fürkészminták számának függvényében. Az ábrán megfigyelhető, hogy a relatív szórásértékek a fürkészminták számával monoton csökkenő tendenciát mutatnak. További figyelemre méltó tulajdonság is kivehető az ábrából: kis fürkészmintaszám mellett (itt $m < 50$) a mintaszám növelésével jelentős javulás érhető el, ám jelen esetben $m > 50$ felhasznált fürkészmintaszám esetén a relatív szórás javulása elhanyagolható, illetve m olyan nagy mértékű növelésével érhető el, ami már nem minden esetben éri meg.



1. ábra. $I = \int_0^a \Sigma e^{-\Sigma x} \cdot x dx$ eredményének relatív szórása a mintavételhez használt fürkészminták számának függvényében

3. Részecsketranszport

Monte-Carlo módszereket gyakran alkalmaznak részecsketranszport szimulációkban; jelen TDK dolgozat is az MC módszerek transzportbeli alkalmazására koncentrál. A szokásos MC transzportfolyamatban a résztvevő részecske sorsáról véletlenszámokkal döntünk. Egy egyszerű esetben a részecske rendelkezik szórási és abszorpciós hatáskeresztmetszettel. Egy véletlenszám és a hatáskeresztmetszetek segítségével sorsolunk szabad úthosszt, illetve egy másik véletlenszámnak hatáskeresztmetszetek arányának relációja határozza meg, hogy a részecske szóródik vagy elnyelődik. Ha pedig a részecske a kijelölt detektor térfogatán belülré kerül, akkor hasadás történik. A részecske hasadása mint esemény fontos eleme a GUARDYAN-nak, a dolgozathoz futtatott szimulációimban viszont ezt még kihagytam azzal a magyarázattal, hogy a részecskék életútját a szimuláció az első hasadásig követi nyomon, a hasadás eseményét pedig egyfajta detektálásként fogtam fel.

3.1. Woodcock-módszer

A részecsketranszport bizonyos eseteiben hasznos, ha több ütközési ponttal dolgozunk, mint amennyi a valóság-hű szimulációhoz szükséges. Több ütközési pontot generál például, ha nagyobb hatáskeresztmetszettel szimulálunk, mint ami a közegre jellemző. A hatáskeresztmetszet módosításával járó módszert nevezik Woodcock-

módszernek, vagy más néven delta-szórásnak [4]. Egy tipikus eset, amikor a módszer alkalmazása szóba jöhet, ha a követett részecske inhomogén közegen halad keresztül, így változik a hatáskeresztmetszet útközben. Ha a változást nem lehet egyszerűen felírni, analóg Woodcock-módszer esetén számolhatunk egy Σ_{maj} majoráns hatáskeresztmetszettel, mely legalább akkora, mint a változó hatáskeresztmetszet legnagyobb értéke. A módszer azért hasznos, mert nem ugorhatunk át vele véletlen olyan tartományokat, melyek kiterjedése az őt körülvevő tartomány által megszabott átlagos szabad úthossznál kisebb, viszont ezen kis tartományra jellemző hatáskeresztmetszet nagyobb.

A Woodcock-módszer kivitelezéséhez Σ_{maj} majoráns hatáskeresztmetszete kívül szükség van még egy paraméterre, a $q = \frac{\Sigma}{\Sigma_{maj}}$ módon definiált elfogadási valószínűségre. Σ az adott helyen az analóg hatáskeresztmetszet.

Ezen paraméterek ismeretében a játék a következőképp néz ki:

- A részecske megérkezik egy adott helyre.
 - Innen új helyet (szabad úthosszat) sorsolunk neki Σ_{maj} felhasználásával a Beer-Lambert törvény alapján, és odamoszgatjuk a részecskét.
 - $(1 - q)$ valószínűséggel visszatérünk az előző lépésre (ekkor történik virtuális ütközés-a részecske haladási iránya nem változik).
 - q valószínűséggel tényleges ütközés történik: a részecske új irányt és szabad úthosszat kap.
- A beütéseket az analóg eseményekből számláljuk.

3.2. Nem analóg Woodcock-módszer [5]

A nem analóg Woodcock-módszer két dologban tér el az előző pontban tárgyaltaktól: a mintavételező hatáskeresztmetszet nem majoráns, azaz tetszőleges értékű lehet (Σ_{samp}), illetve a részecskéket súlyokkal látjuk el (w , kezdetben 1), a beütéseket ezek alapján számoljuk. A felhasznált paraméterek: Σ_{samp} , és q elfogadási valószínűség, mindkettő tetszőleges szabad paraméter, melyek minden helyen tetszőlegesen megválaszthatóak.

A játék a következőképp néz ki:

- A részecske megérkezik egy adott helyre.
- Innen új helyet (szabad úthosszat) sorsolunk neki Σ_{maj} felhasználásával a Beer-Lambert törvény alapján, és odamoszgatjuk a részecskét.
- $(1 - q)$ valószínűséggel visszatérünk az előző lépésre, ám előtte a súlyt korrigáljuk:

$$w_i = w_{i-1} \cdot \frac{1}{(1 - q)} \cdot \left(1 - \frac{\Sigma}{\Sigma_{samp}}\right) \quad (22)$$

→ q valószínűséggel tényleges ütközés történik, a súlyát ekkor:

$$w_i = w_{i-1} \cdot \frac{1}{q} \frac{\Sigma}{\Sigma_{samp}} \quad (23)$$

Az adjungált függvény A 2.4.2. fejezetben láthattuk, hogy amennyiben *a priori* ismerjük az integráláshoz szükséges mintavételező sűrűségfüggvényt és detektorfüggvényt, akkor elérhető, hogy a számításaink eredményének szórása 0 legyen. Ebből kiindulva feltételezhetjük, hogy amennyiben a traszport során vizsgált geometria minden egyes pontjában ismernénk annak a valószínűségét, hogy az adott pontból mekkora eséllyel jut a részecske a detektorba, a transzportszimuláció eredménye 0 szórással rendelkezne. Ezt a függvényt, mely minden pontra megmondja a részecske detektorba jutásának valószínűségét, adjungált függvénynek nevezzük [4]. Az adjungált függvényt általában nem lehet analitikusan meghatározni, a cél általában annak szórás és futásidő tekintetében minél hatékonyabb közelítése.

3.3. A szabad úthossz torzítása [2]:

A szabad úthossz sorsolás torzításának kérdésére általában az exponenciális transzformáció a válasz. Az exponenciális transzformáció gyakorlati alkalmazásakor viszont könnyen megjelenhet egy-egy olyan mértékű súllyal rendelkező részecske, mely elronthatja a szimuláció szórását. A probléma fellépése általában változó hatáskeresztmetszetű anyag vagy nem meghatározott anyagvastagságon keresztüli transzmisszió esetén gyakori. Ennek az a magyarázata, hogy az exponenciális transzformáció torzítását csak egyszerű, homogén transzmissziós esetekre szokták optimalizálni. A következőkben egy térben változó $\Sigma(x)$ hatáskeresztmetszet és térben változó adjungált esetére kedvező szabadúthossz-sorsolási torzítási módszerrel ismerkedhetünk meg [2] 4. Térfüggő hatások c. fejezete alapján. Az alább ismertetett gondolatmenet általános függvény esetére alkalmazható mind exponenciális transzformáció, mind nem analóg Woodcock-módszer adjungált alapú mintavételezésére.

Legyen egy $\phi^+(x)$ adjungált függvényünk és egy térben változó hatáskeresztmetszetű anyagunk, melyben szabadúthosszan sorsolunk. A sorsolás akkor ideális, ha a következő integrál becslése egzakt:

$$I = \int_0^a \Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(x') dx'} \phi^+(x) dx, \quad (24)$$

ahol a a geometria határa.

Az ideális mintavételező függvény (pdf_{id}):

$$pdf_{id}(x) = \Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(x') dx'} \phi^+(x) / I \quad (25)$$

Egy ilyen alakú függvény mintavételezése nehézségekbe ütközik: egyrészt nincs garantálva, hogy $\phi^+(x)$ mintavételezhető, másrészt ha nem is lenne benne a képletben, a szabadúthossz-sorsolása csak szakaszosan konstans függvény esetén van egyszerű megoldás. Jól bevált recept nélkül a függvény határozatlan integrálját kell előállítanunk a mintavételezéshez minden egyes részecskeirányra külön-külön. Folytonosan változó hatáskeresztmetszet mellett történő szabadúthossz sorsolás esetén használható a Woodcock-módszer, mellyel torzítatlan mintavételezés is megoldható, még akkor is, ha a hatáskeresztmetszet majoránsát nem ismerjük, ekkor a fenti integrálásra nincsen szükség.

Állítsuk elő a pdf_{id} függvényt olyan alakban, mintha folytonosan változó $\Sigma_Z(x)$ hatáskeresztmetszet volna. Ehhez használjuk a Beer-Lambert törvény pdf formájának folytonos hatáskeresztmetszetű alakját (annak érdekében, hogy szabadúthossz sorsoláshoz felhasználható pdf-et kapjunk):

$$pdf_{id}(x) = \Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(x') dx'} \phi^+(x) / I = \Sigma_Z(x) e^{-\int_0^x \Sigma_Z(x') dx'} \quad (26)$$

$\Sigma_Z(x)$ előállításához integráljuk mindkét oldalt 0 és y között, majd az egyenletet átrendezve és mindkét oldalt deriválva Σ_Z -re kapott alak:

$$\Sigma_Z(x) = \frac{\Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(x') dx'} \phi^+(x)}{\int_x^a \Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(x') dx'} \phi^+(x) dx} \quad (27)$$

A $\Sigma_Z(x)$ -vel megfogalmazott pdf mintavételezéséhez válasszunk egy $\Sigma_S(x)$ mintavételező hatáskeresztmetszetet. Az ütközés q elfogadási valószínűsége, mely (26) ideális mintavételezését adja.:

$$q = \frac{\Sigma_Z(x)}{\Sigma_S(x)} \quad (28)$$

$\Sigma_S(x)$ megválasztásához fontos szempont, hogy legyen lehetőleg $\Sigma_S(x) > \Sigma(x)$, hogy ne tömegesen kapjunk negatív súlyokat. Továbbá szintén legyen $\Sigma_S(x) > \Sigma_Z(x)$, annak érdekében, hogy ne mintavételezzük alul az adjungált miatt fontos tartományokat. Amennyiben az első kritériumot nem kellene figyelembe vennünk, akkor sem lenne előnyös, ha $\Sigma_S(x) = \Sigma_Z(x)$, mert az ideális mintavételező hatáskeresztmetszet olykor nagyon kis hatáskeresztmetszetet javasolhat, mellyel viszont a hirtelen besűrűsödő $\Sigma_Z(x)$ tartományát átugorhatnánk és így alulmintavételeznénk. Amennyiben mégis bizonyos szakaszon megengedhetnénk magunknak ezt a választást, akkor q konstans volna.

A séma felfogható úgy is, hogy mindenhol a lehető leghígabb hatáskeresztmetszetet választjuk, de ami még a valós hatáskeresztmetszetek tekintetében és $\Sigma_Z(x)$ értelmében is majoráns. q pedig gondoskodik arról, hogy valós ütközés a detek-

tálás szempontjából megfelelő haladási irányokban ritkábban, a "rossz" irányokba haladva pedig gyakrabban történjen.

4. 2D-s geometriában történő vizsgálatok

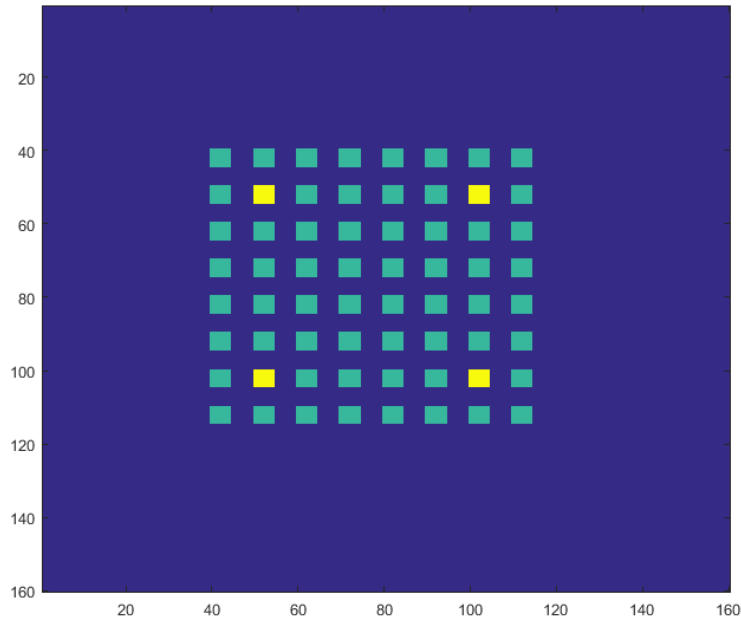
A dolgozat vizsgálatait a 2. ábrán látható geometriára végeztem. Egy már megírt részecsketranszport kódba építettem bele a fürkészmintákkal való iránytorzító mintavételezést. Az alap egy 160×160 egység méretű négyzet alakú közeg az ábrán sötétkékkel, melyben egy 8×8 -as rácsban hasadóanyag (detektorok) figyelhetők meg világoskékkel, melyek közül 4 abszorbens, ezek sárga színnel vannak jelölve. Az elrendezés egy egyszerű közelítése egy reaktor aktív zónájának, ahol az itteni detektor megfelel a hasadóanyagnak, az abszorbensek pedig szabályozórudaknak. Az egyes anyagok reakció-hatáskeresztmetszeteinek értéke a 1. táblázatban található. A szimulációkba a Woodcock-módszer is be van építve; a módszer alkalmazásához szükséges majoráns hatáskeresztmetszet a mindenkori legnagyobb hatáskeresztmetszet értékének 1.1-szerese. A transzportfolyamatot a detektálásig, vagyis az első hasadásig követjük nyomon. Annak megakadályozása érdekében, hogy egy abszorpciót, kiszökést és hasadást valahogy mindig elkerülő részecskét se kövessünk a végtelenségig, a kódban kapnak egy konstans sebességet, és egy időkorlátot, amit ha túllépnek, akkor nem követjük őket tovább. Ez a dolgozat esetében $v = 1$ egység, és $T = 50$ egység volt.

Reakció-hatáskeresztmetszet	Közeg	Hasadóanyag	Abszorbens
Σ_{tot} (teljes)	0.01	0.02	0.05
Σ_a (elnyelési)	0.002	0	0.04
Σ_s (szórási)	0.008	0	0.01
Σ_f (hasadási)	0	0.02	0

1. táblázat. A geometria elemeinek reakció-hatáskeresztmetszetei

4.1. Az irányfüggő adjungált felosztása

Adjungált függvényt a fázistér összes koordinátája szerint lehet értelmezni. A mi helyzetünkben az adjungáltat a részecskék irányától és pozíciójától függőnek tesszük fel, azaz hogy a részecskének fázistér egy pontjából az adott irányba indítva mekkora járuléka lesz a detektáláshoz. Ennek numerikus meghatározásához osszuk fel a részecske teljes 360 fokos indítási szögtartományát n részre, és minden tartományból N részecskét indítva jegyezzük fel az adott tartományhoz tartozó detektálás értékét! Ezt a vizsgálat tárgyát képező teljes geometriára elvégezve megkapjuk



2. ábra. A vizsgálatok során használt geometria

annak irányfüggő numerikus adjungált függvényét. Az ebből történő mintavételezéshez először egy egyenletes eloszlású véletlenszámmal meghatároztam, hogy melyik szögtartományból kerüljön ki a minta, majd egy másik egyenletes véletlenszámmal sorsoltam szöget az adott tartományon belülről.

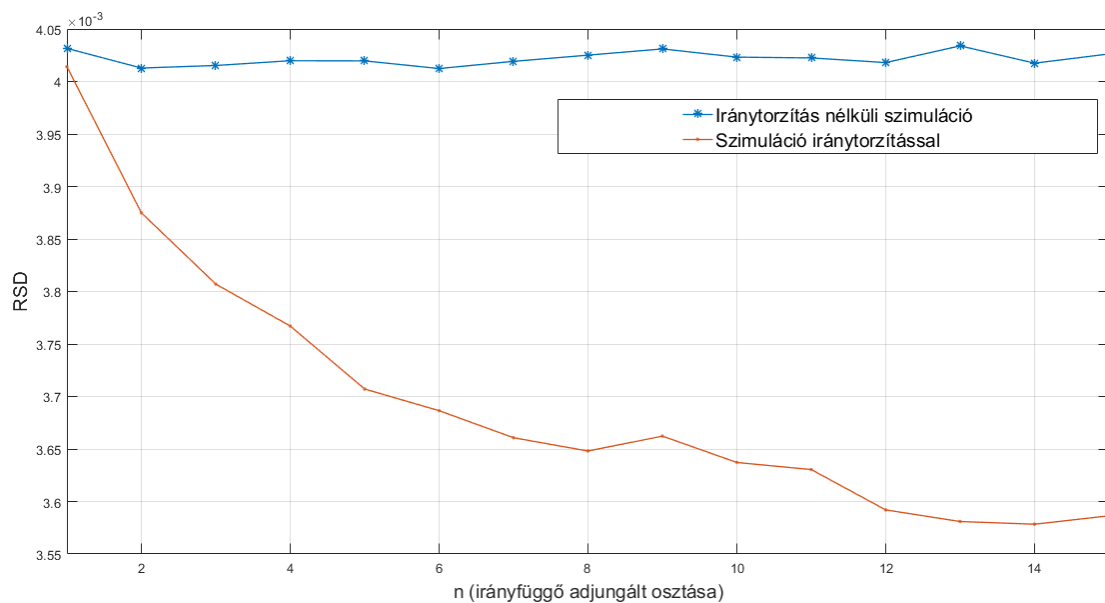
Az adjungált pontossága főképp azon múlik, hogy a teljes szögtartományt hány részre osztottuk (tehát n -től), hogy hány részecskét indítottunk egy pontból, illetve hogy az adott geometriát milyen sűrű ráccsal fedtük le a vizsgálatához, tehát hogy hány, és milyen elhelyezkedésű pontokban vettük fel az irányfüggő adjungált függvényt.

A generált adjungált alapján történő iránytorzított mintavételezés a gyakorlatban tulajdonképpen azt jelenti, hogy a transzport során a részecskének nagyobb valószínűséggel sorsolunk detektor felé mutató irányt, amit aztán a súlyozásban korrigálunk.

A vizsgált geometrián arra voltam kíváncsi, hogy az indítási szögtartománynak mi az a legdurvább felosztása, amivel az elvégzett szimuláció szórásában már jelentős javulás tapasztalható a módszer alkalmazása nélkül elvégzethez képest.

A legkevesebb felosztású, ám már számottevő szóráscsökkenéssel járó irányfüggő adjungált kereséséhez a következőképp végeztem szimulációkat:

Az alap geometria összes rácspontjára (tehát az egész koordinátákkal rendelkező pontokra) az indítási szögtartomány különböző számú részekre osztása mellett felvettem az irányfüggő adjungáltakat. Ezután az összes adjungálttal külön-külön lefuttattam a szimulációt úgy, hogy az egyes részecskék kiindulási helyét az egész geometriából véletlenszerűen, egyenletes eloszlással vettem. A majoráns hatáske-resztszemetet $\Sigma_{maj} = 0.055$. Az eredményeket a textit3. ábrán szemléltettem. A végzett szimulációk *VOV*-ja minden esetben 10^{-2} vagy annál kisebb nagyságrend-be esett, a közölt szórásértékek ezért stabilnak mondhatóak.



3. ábra. Iránytorzítás nélküli és különböző felosztású irányfüggő adjungált szerint mintavételezett szimulációk relatív szórásának alakulása

A 3. ábrán az látható, hogy 1-től 15-ig növelt osztással rendelkező adjungált szerinti iránytorzítással végzett szimulációk szórása (narancssárgával) hogyan alakul egy iránytorzítással nem rendelkező (alap) szimulációhoz (kézzel) képest. Az $n = 1$ osztás azt jelenti, hogy a teljes 360 fokos szögtartományt egy részre osztjuk fel, vagyis a torzításmentes esetet. Ennek eredményének meg kell egyeznie az összehasonlításhoz használt szimuláció eredményével, ami az ábra alapján teljesül is.

A 2-4. táblázatok első sorában az adjungált felosztását, második és harmadik sorában az alap és iránytorzítással végzett szimulációk szórását láthajtuk, az utolsó sorokban pedig az előző kettő arányát, mely azt mondja meg, mekkora az iránytorzított szórás az eredetihez képest (minél kisebb ez a szám, annál jobb).

n	1	2	3	4	5
\mathbf{RSD}_{base}	4.032E-03	4.013E-03	4.015E-03	4.020E-03	4.020E-03
\mathbf{RSD}_{dir}	4.014E-03	3.875E-03	3.807E-03	3.767E-03	3.707E-03
$\mathbf{RSD}_{dir}/\mathbf{RSD}_{base}$	9.957E-01	9.656E-01	9.481E-01	9.371E-01	9.222E-01

2. táblázat. Az irányfüggő adjungált felosztása, alap és iránytorzítással végzett szimulációk szórása, és szórások aránya–I.

n	6	7	8	9	10
\mathbf{RSD}_{base}	4.012E-03	4.019E-03	4.025E-03	4.031E-03	4.023E-03
\mathbf{RSD}_{dir}	3.686E-03	3.661E-03	3.648E-03	3.662E-03	3.637E-03
$\mathbf{RSD}_{dir}/\mathbf{RSD}_{base}$	9.188E-01	9.108E-01	9.063E-01	9.085E-01	9.040E-01

3. táblázat. Az irányfüggő adjungált felosztása, alap és iránytorzítással végzett szimulációk szórása, és szórások aránya–II.

n	11	12	13	14	15
\mathbf{RSD}_{base}	4.022E-03	4.018E-03	4.034E-03	4.017E-03	4.026E-03
\mathbf{RSD}_{dir}	3.630E-03	3.592E-03	3.581E-03	3.578E-03	3.586E-03
$\mathbf{RSD}_{dir}/\mathbf{RSD}_{base}$	9.025E-01	8.940E-01	8.877E-01	8.907E-01	8.908E-01

4. táblázat. Az irányfüggő adjungált felosztása, alap és iránytorzítással végzett szimulációk szórása, és szórások aránya–III.

Az irányfüggő adjungált felosztásának szükséges számához tovább vizsgáltam a szórások arányát. Azt néztem meg, hogy mekkora a nyereség az adott felosztásig: 5-7. táblázatok második sora, illetve hogy az adott felosztástól az utolsóig ($n = 15$) mekkora nyereséget érünk még el (harmadik sorok).

\mathbf{n}_i	1	2	3	4	5
$\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_1$	0	0.0300	0.0475	0.0585	0.0734
$\mathbf{n}_{15} - \mathbf{n}_i$	0.1049	0.0749	0.0574	0.0464	0.0315

5. táblázat. A vizsgált osztástartományon elért nyereség megoszlása az adott felosztásig–I.

A szükséges osztásszám meghatározásához olyan oszlopokat kell keresnünk, ahol az adott felosztásig elért nyereség nagyobb, mint azt azt követően elért nyereség. Ez leghamarabb 4 osztásnál következik be, ezért a további szimulációkban az irányfüggő adjungáltat 4 osztással vettem fel.

Egy további vizsgálatban az iránytorzítás hatását a szabadúthossz-torzítással kombinálva is megfigyeltem. Az eredményt a 4. ábrán mutatom be. Az ábráról

\mathbf{n}_i	6	7	8	9	10
$\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_1$	0.0769	0.0849	0.0893	0.0871	0.0916
$\mathbf{n}_{15} - \mathbf{n}_i$	0.0280	0.0201	0.0156	0.0178	0.0133

6. táblázat. A vizsgált osztástartományon elért nyereség megoszlása az adott felosztásig–II.

\mathbf{n}_i	11	12	13	14	15
$\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_1$	0.0931	0.1017	0.1080	0.1050	0.1049
$\mathbf{n}_{15} - \mathbf{n}_i$	0.0118	0.0032	0.0030	0.00005	0

7. táblázat. A vizsgált osztástartományon elért nyereség megoszlása az adott felosztásig–III.

egyből feltűnik, hogy a szabadúthossz-torzítás alkalmazása az iránytorzításhoz viszonyítva nagyobb szórásbeli nyereséggel jár, a kombinált alkalmazás során pedig járuléka konszansnak tűnik. Hogy ezt alátámasszam, vettem a csak szabadúthossz-torzítással illetve a szabadúthossz-és iránytorzítással végzett szimulációk szórásának különbségét ($d_{fp,i}$), majd vettem az alap és a csak iránytorzítással végzett szimulációk szórásának különbségét ($d_{dir,i}$) is minden osztás esetében, majd az így kapott két különbségnek is képeztem a különbségét (Δd_i). Ha a szabadúthossz-torzítás járuléka konstans, akkor ezeknek a végső különbségeknek átlagának ($\overline{\Delta d}$) 0 közeli értékeknek kell lennie. Az így megkapott átlag:

$$\overline{\Delta d} = 4.0765 \cdot 10^{-5},$$

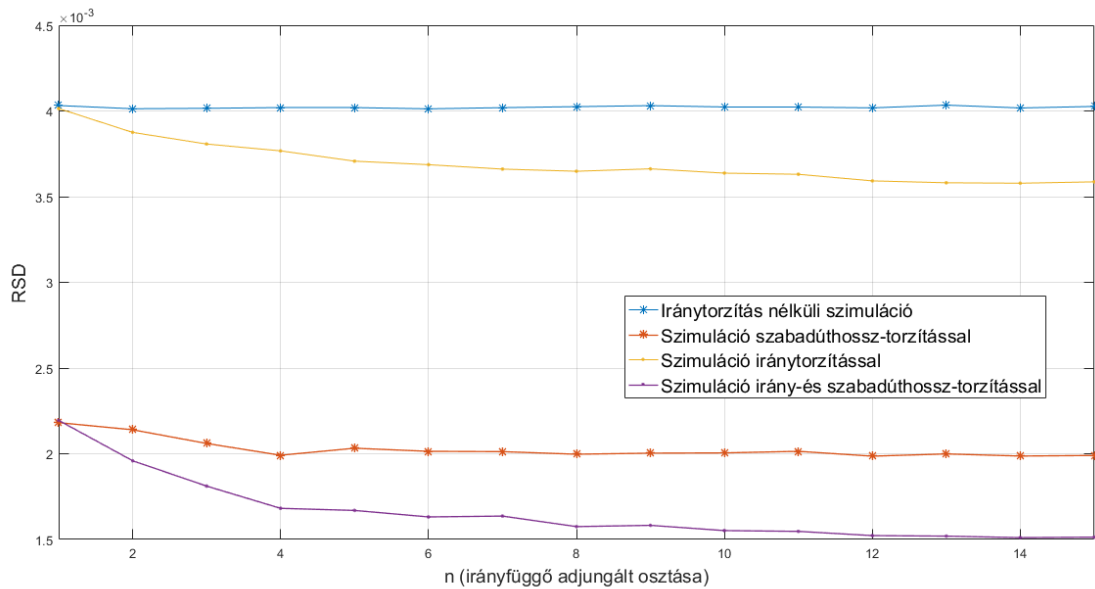
melynek szórása:

$var_{\Delta d} = 2.47 \cdot 10^{-5}$ A kapott átlag 0 közeli értéket ad, ami alátámasztja a feltételezést, hogy konstans járulékot a szabadúthossz-torzítás a kombinált szimuláció szórásának javulásához. $Var_{\Delta d}$ értéke elég nagy, de figyelembe véve, hogy ezen a szóráson belül is még 10^{-5} -es tartományban marad az eredmény, ez az érték elfogadható.

4.2. Irányfüggő adjungált közelítése fürkészmintákkal

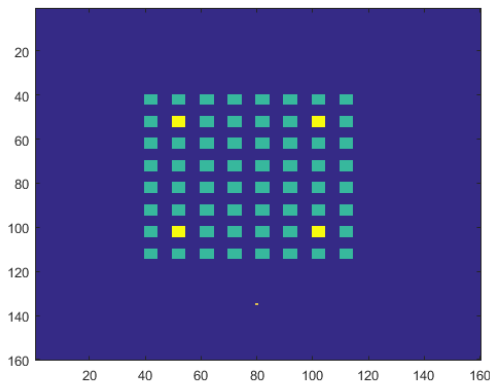
Az irányfüggő adjungált direkt numerikus mintavételezése sokszor bonyolult és nehezen megoldható lehet. Ezt közelíti az egyszerűbben kivitelezhető fürkészmintákkal történő mintavételezés. Ebben a fejezetben céлом annak kiderítése, hogy legkevesebb hány fürkészmintával lehet már elfogadható közelítését adni a direkt numerikus mintavételezésnek.

A vizsgálatot két specifikus pontra végeztem el: az egyik egy, a geometria elemei szempontjából külső pontból, a másik pedig ugyanebből a szempontból egy

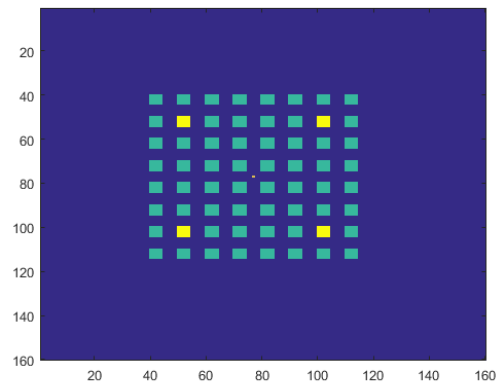


4. ábra. Iránytorzítás nélküli, iránytorzítással, szabadúthossz-torzítással illetve irány-és szabadúthossz-torzítással végzett szimulációk relatív szórásának alakulása

belső pontból indított részecskékkel történt. Ezt a két pontot figyelhetjük meg a 5-6. ábrákon. Azért erre a két pontra esett a választás, mert az irányfüggő adjungáltjukban lényegi különbség van: míg kinti pontból egyértelműen egy irány az, ami preferált (ami a rács felé mutat), a belső pontból az adjungálnak több helyen is maximuma lehet, vagyis iránytorzítás szempontjából több kitüntetett irány is jelen van.



5. ábra. A vizsgálatához kiválasztott geometrián kívüli pont



6. ábra. A vizsgálatához kiválasztott geometrián belüli pont

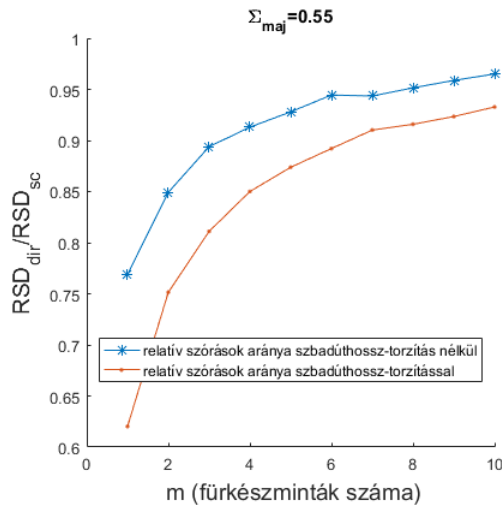
A fürkészminták módszerének tanulmányozásához a szimulációkat a vizsgált geometria elemeinek többféle hatáskeresztmetszetével elvégeztem. A hatáskeresztmetszet-arányok megtartásához az alap (1. táblázat) hatáskeresztmetszet-értékeket csak egy konstans szorzófaktorral változtattam. Az alkalmazott fürkészminták számát $m = 1$ és $m = 10$ között változtattam.

4.2.1. Vizsgálat külső pontból induló részecskékkel

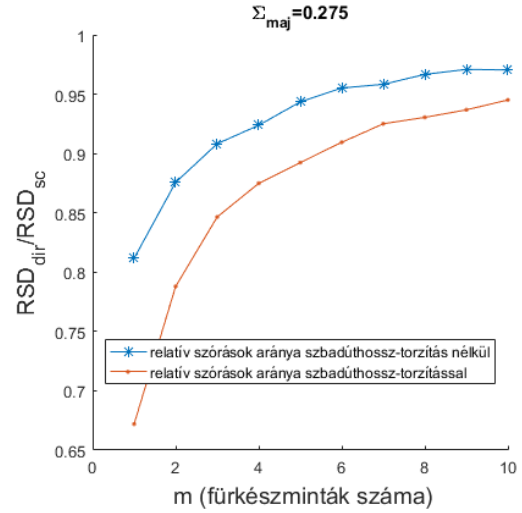
A részecskék kiindulási helyéül szolgáló külső pont koordinátái: (135, 80). Ettől a ponttól a legközelebbi hasadóanyag/detektor ~ 20 egység távolságra van. Az egyes hatáskeresztmetszet-szettekhez tartozó majoráns hatáskeresztmetszetek $\Sigma_{maj} = 0.0275$ -től $\Sigma_{maj} = 0.55$ -ig terjedtek. Ezek átlagos szabadúthosszban nézve 1.8 – 36.4 egységnek felelnek meg. Így lesz a szimulációk közt olyan is, melyben akár egy irány-és szabadúthossz sorsolás után vége lehet a részecske életének.

A szimulációk eredményeit azok szórása szempontjából elemeztem. Hogy a fürkészmintákkal elért szórásbeli eredményeket (RSD_{sc}) össze lehessen hasonlítani a direkt iránytorzítással végzett szimulációk során kapott szórásokkal (RSD_{dir}), mindkettővel elvégeztem a különböző hatáskeresztmetszeten vett szimulációkat. A kapott eredmények szórásait hasonlítottam össze a 7-10. ábrákon. Az állítás az, hogy ha a fürkészmintákkal végzett iránytorzító szimuláció tökéletesen közelítené a direkt iránytorzítást, akkor a kétféle módon elvégzett szimuláció szórásának hányadosa 1-et adna, a tökéletlenség miatt azonban ez a RSD_{sc}/RSD_{dir} hányados csak alulról közelítheti az 1-et. Az ábrákból ez jól kivehető, és megállapítható: a részecsketranszport-szimuláció szórását tényleg lehet fürkészmintákkal javítani, és ez a javulás a fürkészminták számát növelve tart a direkt numerikus módszerrel végzett iránytorzítással futtatott szimulációk szórásához.

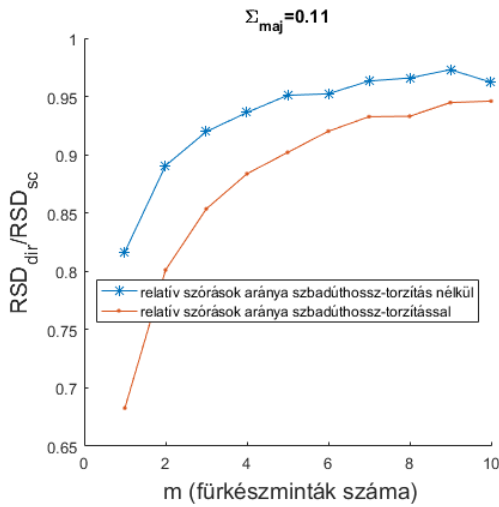
Érdemes megfigyelni a 10. ábrát külön. A részecskék szabad úthossza ezen a tartományon a legnagyobb, nagyobb, mint a kiindulási pont és a "rács" (hasadóanyagok és abszorbensek) távolsága, és ez szabadúthossz-torzítás nélkül már instabilitásokat okoz a rendszerben. Összehasonlításképp ez a belső pontból indított részecskék esetén már a forrás–hasadóanyag távolság felétől fennáll.



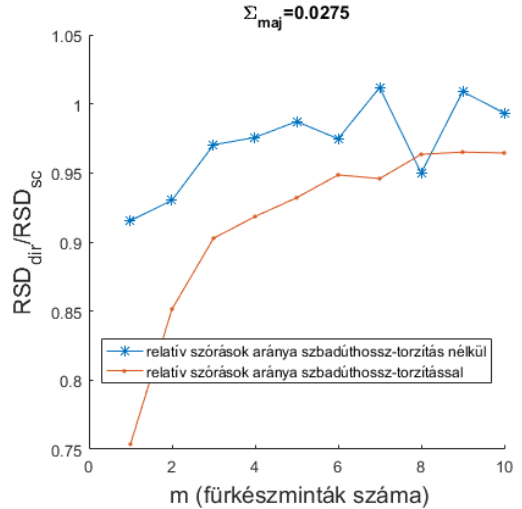
7. ábra. A fűrészmintákkal végzett szimulációk szórásának aránya a direkt iránytorzításhoz képest $\Sigma_{maj} = 0.55$ mellett



8. ábra. A fűrészmintákkal végzett szimulációk szórásának aránya a direkt iránytorzításhoz képest $\Sigma_{maj} = 0.275$ mellett



9. ábra. A fűrészmintákkal végzett szimulációk szórásának aránya a direkt iránytorzításhoz képest $\Sigma_{maj} = 0.11$ mellett



10. ábra. A fűrészmintákkal végzett szimulációk szórásának aránya a direkt iránytorzításhoz képest $\Sigma_{maj} = 0.0275$ mellett

A fűrészminták szükséges számának meghatározásához azt vizsgáltam meg, hogy az egyes hatáskeresztmetszetekkel végzett szimulációk szórásában a direkt

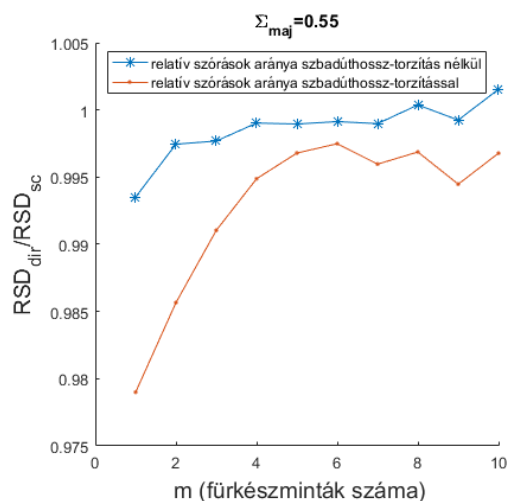
numerikus mintavételezés maximális (ideális esetben $m = 15$ -höz tartozó) megközelítésének 80%-át mikor lépjük át. Ez külső pontból indítva a szimulációkat szabadúthossz-torzítással és anélkül futtatva is $m = 5$ -nek adódott. Amennyiben viszont van ráfordítható erőforrásunk illetve számítási kapacitásunk, a mintaszám növelésével még javíthatunk a szórási eredményeinken

4.2.2. Vizsgálat belső pontból induló részecskékkel

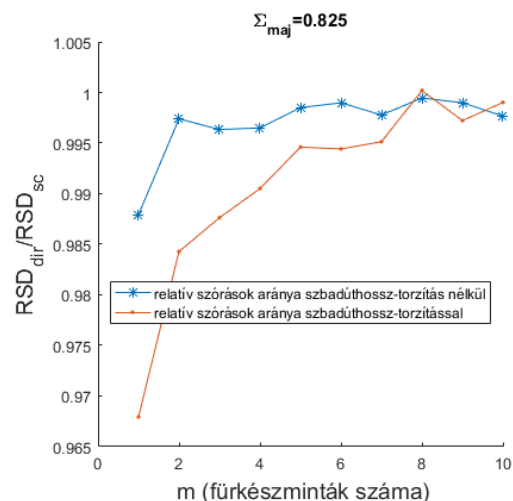
A részecskék kiindulási helyéül szolgáló belső pont koordinátái: $(77, 77)$. Ettől a ponttól a legközelebbi hasadóanyag/detektor ~ 3.6 egység távolságra van.

A különböző hatáskeresztmetszet-szettekhez tartozó majoráns hatáskeresztmetszetek $\Sigma_{maj} = 0.55$ -től $\Sigma_{maj} = 1.925$ -ig terjedtek. Ezek átlagos szabadúthosszban nézve $0.52 - 1.8$ egységnek felelnek meg. Ezek az értékek ugyan kisebbek, mint a legközelebbi hasadóanyag távolsága, ám még így is látni szórásbeli instabilitásokat. A fürkészminták viselkedésével kapcsolatos további elvárások az előző alfejezethez hasonlóan állnak fenn. Az eredményeket a 11-14. ábrákon mutatom be.

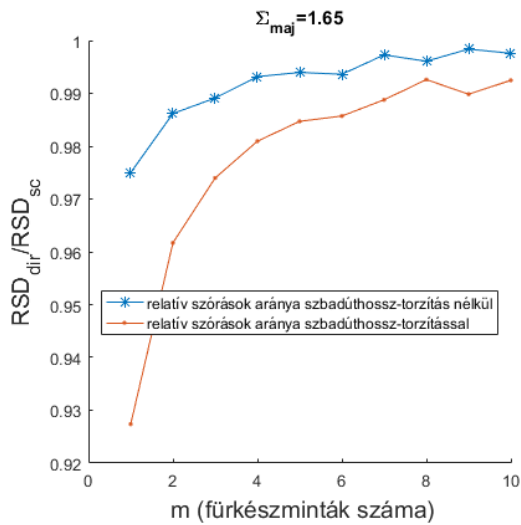
A főképp a 11. és 12. ábrán szembeűnő instabilitásokat valószínűleg a "zsúfolt" elrendezés okozza, azaz hogy felvett irányfüggő adjungáltak nem egy, jól meghatározott helyen van maximuma. A szabadúthossz-torzítás stabilizáló hatását azonban itt is megfigyelhetjük.



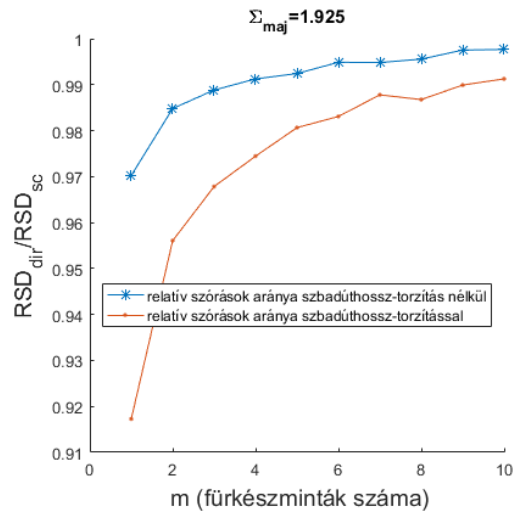
11. ábra. A fürkészmintákkal végzett szimulációk szórásának aránya a direkt iránytorzításhoz képest $\Sigma_{maj} = 0.55$ mellett



12. ábra. A fürkészmintákkal végzett szimulációk szórásának aránya a direkt iránytorzításhoz képest $\Sigma_{maj} = 0.825$ mellett



13. ábra. A fűrészmintákkal végzett szimulációk szórásának aránya a direkt iránytorzításhoz képest $\Sigma_{maj} = 1.65$ mellett



14. ábra. A fűrészmintákkal végzett szimulációk szórásának aránya a direkt iránytorzításhoz képest $\Sigma_{maj} = 1.925$ mellett

A szükséges fűrészmintaszámra az előző fejezetben már megfogalmazott kritériumot javaslom, tehát az ideális mintavételezés megközelítés maximumának 80%-át átlépő mintaszámot. Ez a stabil szórású szimulációk esetében $m = 4$ és $m = 5$ között ingadozott. A kintről indított részecskék esetében kapott eredményekből kiindulva az $m \geq 5$ db fűrészminta ajánlott.

5. Összefoglalás, konklúziók

TDK dolgozatomban legfőképpen a fürkészminták alkalmazásának feltételeire, körülményeire koncentráltam. Ehhez egy köztes lépésben először az irányfüggő adjungált direkt numerikus mintavételezéssel kerestem az adjungált legdurvább, ám már érdemi nyereséget hozó felosztását. Munkám következő részében az ezzel a felosztással elért nyereséget igyekeztem fürkészminták felhasználásával történő mintavételezéssel közelíteni. A vizsgálat kitért arra, hogy egy meghatározott direkt módszerhez mért közelség eléréséhez minimálisan hány fürkészmintára van szükség. Vizsgálat tárgya volt továbbá, hogy ezt elvégezzem az egész dolgozat során használt geometria kitüntetett pontjaira és a geometriai elrendezés elemeinek eltérő paramétereivel (hatáskeresztmetszet).

A kapott eredmények alátámasztják azt, hogy fürkészminták felhasználásával történő iránytorzító mintavételezéssel javítható a részecsketranszport-szimuláció szórása. További vizsgálódási irány lehet a reakció-hatáskeresztmetszetek energiafüggésének bevitele a rendszerbe, illetve a módszert más, bonyolultabb, esetlegesen egy reaktor aktív zónáját pontosabban modellező geometriában is kipróbálni.

Hivatkozások

- [1] *MCNP—A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5.*
- [2] D. Legrady G. Tolnai. Időfüggő Neutrontranszport Atomreaktorokban: Nullaszórású Monte Carlo becslés. 2018.
- [3] GUARDYAN. <http://awing.reak.bme.hu/GUARDYAN/wiki/WikiStart>.
- [4] L. Koblinger I. Lux. *Monte Carlo Particle Transport Methods.* CRC Press, 1991.
- [5] D. Legrady B. Molnar M. Klausz, T. Major. Woodcock tracking with arbitrary sampling cross section using negative weights. 2016.
- [6] TRIPOLI. <https://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1716>.