

# GUARDYAN fejlesztési segédlet

Készítette: Tolnai Gábor

2018. december 17.

# Tartalomjegyzék

<b>1. SVN és Trac használata</b>	<b>6</b>
1.1. Subversion . . . . .	6
1.2. Trac . . . . .	8
1.2.1. Awing belépés . . . . .	9
<b>2. Fordítás és futtatás</b>	<b>11</b>
2.1. Checkout . . . . .	11
2.2. A környezeti változók beállítása . . . . .	11
2.3. Függősségek . . . . .	11
2.4. Fordítás . . . . .	11
2.5. Branches - qtZeroVariance . . . . .	12
2.6. Branches - sourceconvergence . . . . .	17
2.7. Branches - realistic . . . . .	17
2.8. Branches - eventbased . . . . .	18
2.9. Branches - thermohydraulics . . . . .	21
2.10. Trunk . . . . .	21
2.11. Tags . . . . .	21
2.12. Qt . . . . .	21
2.13. Doxygen . . . . .	22
<b>3. Realisztikus geometria</b>	<b>24</b>
3.1. Felületek . . . . .	24
3.2. Cellák . . . . .	26
3.3. Univerzumok . . . . .	27
3.4. Rácsok . . . . .	27
3.5. Transzformációk . . . . .	27
3.6. Geometria leíró . . . . .	28
<b>4. Realisztikus hatáskeresztmetszetek</b>	<b>29</b>
4.1. Izotópok . . . . .	30
4.2. Anyagok . . . . .	31
4.3. Anyagi leíró . . . . .	31
<b>5. Geometriai és anyagi leírók tesztelése</b>	<b>32</b>
<b>6. Fizikai modellek</b>	<b>33</b>
6.1. Szabad úthossz sorsolás . . . . .	33
6.2. Izotóp és reakció sorsolása . . . . .	34
6.3. $(n, \gamma)$ és egyéb elnyelési reakciók . . . . .	34
6.4. Rugalmas szórás . . . . .	35

6.5.	Rugalmatlan szórás . . . . .	36
6.6.	Másodlagos részecskék szögeloszlása . . . . .	37
6.6.1.	Egyenletes eloszlású szög sorsolása . . . . .	37
6.6.2.	Táblázatos szögeloszlás . . . . .	38
6.6.3.	ACE Law 44 - Kalbach-Mann korrelált szórás . . . . .	39
6.6.4.	Irányvektor meghatározása . . . . .	40
6.7.	Másodlagos részecskék energiaeloszlása . . . . .	41
6.7.1.	ACE Law 3 - Inelastic Level Scattering . . . . .	41
6.7.2.	ACE Law 4 - Folytonos táblázatos eloszlás . . . . .	42
6.7.3.	ACE Law 7 - Maxwell-féle hasadási spektrum . . . . .	43
6.7.4.	ACE Law 9 - Párolgási spektrum . . . . .	43
6.7.5.	ACE Law 11 - Energiafüggő Watt spektrum . . . . .	44
6.7.6.	ACE Law 44 - Kalbach-Mann korrelált szórás . . . . .	44
6.7.7.	ACE Law 61 - Korrelált energia és szög eloszlás . . . . .	44
6.7.8.	ACE Law 66 - N-Body Phase Space Distribution . . . . .	45
6.8.	Koordináta-rendszer transzformációk . . . . .	45
6.9.	A hőmozgás hatása a hatáskeresztmetszetre . . . . .	46
6.9.1.	Konstans hatáskeresztmetszet modell . . . . .	47
6.9.2.	Energiafüggő hatáskeresztmetszet modell . . . . .	50
6.10.	$S(\alpha, \beta, T)$ táblázatok . . . . .	50
6.10.1.	Rugalmas szórás . . . . .	51
6.10.2.	Rugalmatlan szórás . . . . .	52
6.11.	Feloldatlan rezonanciák . . . . .	53
6.12.	Késő neutronok . . . . .	54
<b>7.</b>	<b>Algoritmusok</b>	<b>56</b>
7.1.	Forráskonvergencia . . . . .	56
7.2.	Prekurzor generálás . . . . .	56
7.3.	Véletlenszám generátor . . . . .	56
7.4.	Energia keresés . . . . .	57
7.5.	Interpolációs sémák . . . . .	57
7.6.	Cella definíciók kibontása . . . . .	58
7.7.	Cella keresés . . . . .	58
7.8.	Cella keresés gyorsítása . . . . .	61
7.9.	Transzformációk . . . . .	61
7.10.	Event-based kernel . . . . .	62
7.11.	Prekurzorok és késő neutronok . . . . .	63
7.12.	Adjungált függvény becslése . . . . .	64
7.13.	$k_{eff}$ becslés . . . . .	64
7.14.	$k_d$ becslése . . . . .	64

<b>8. Szóráscsökkentés</b>	<b>65</b>
8.1. Populáció-kontrol . . . . .	65
8.2. Szakaszonkénti fésülés . . . . .	67
8.2.1. Egyenlő súlyok módszere . . . . .	67
8.2.2. Adjungált alapú módszer . . . . .	67
8.2.3. Összehasonlítás . . . . .	67
<b>9. Verifikáció</b>	<b>68</b>
9.1. Guardyan futtatása . . . . .	68
9.2. Tally-k meghatározása . . . . .	68
9.3. MCNP futtatása . . . . .	68
9.4. Eredmények kiértékelése . . . . .	69
9.5. Urán-oxid rudak víz gömbben . . . . .	69
<b>10. History- és event-based összehasonlítás</b>	<b>71</b>
10.1. Izotópok . . . . .	71
10.2. Urán rudak víz gömbben . . . . .	71
<b>11. Futási idő optimalizáció I.</b>	<b>72</b>
11.1. Regiszter szám csökkentése . . . . .	72
<b>12. Futási idő optimalizáció II.</b>	<b>74</b>
12.1. A vizsgált modell . . . . .	74
12.2. Adjungált és $\Sigma_Z$ számítás . . . . .	74
12.3. Torzítási lehetőségek a Woodcock-módszerben . . . . .	76
12.3.1. Woodcock-módszer . . . . .	76
12.3.2. Implicit befogás . . . . .	76
12.3.3. Adjungált függvény használata . . . . .	76
12.3.4. Ray tracing . . . . .	77
12.4. Paramétervizsgálat . . . . .	78
12.4.1. Irány szerinti felbontás . . . . .	78
12.4.2. Teljes hataskeresztmetszet . . . . .	79
12.4.3. Abszorpciós hataskeresztmetszet . . . . .	79
12.4.4. Ray tracing rács felbontása . . . . .	79
12.4.5. Adjungált és $\Sigma_Z$ felbontása . . . . .	80
12.4.6. $\Sigma_{Samp}$ választása . . . . .	80
12.5. Raytracing alkalmazása a Guardyanban . . . . .	83
12.5.1. Voxelek anyagának meghatározása . . . . .	83
12.5.2. Majoráns számolás energiacsoportokra . . . . .	83
12.5.3. Futási idők összehasonlítása . . . . .	83

<b>13. ICSBEP</b>	<b>85</b>
<b>14. BME Oktatóreaktor</b>	<b>87</b>
14.1. Rúdejtés és rúdfelhúzás szimuláció . . . . .	87
14.2. Pálcánkénti teljesítmény . . . . .	88
14.3. Kadmium-gyűrűs mérés . . . . .	88
<b>15. VVER-440</b>	<b>91</b>
<b>16. Felhasznált fizikai állandók</b>	<b>92</b>
<b>17. Felhasznált mintavételezési sémák [10]</b>	<b>93</b>

# Bevezetés

A GUARDYAN (*GPU Assisted Reactor Dynamic Analysis*) egy GPU-n (*Graphics Processing Unit*) futó Monte Carlo alapú neutrontranszport program. A szimuláció másodrendű felületek által meghatározott háromdimenziós térben követi a neutronok mozgását miközben azok kölcsönhatásba lépnek a térfogatban található izotópokkal. A transzport során folytonos energieloszlásokkal dolgozunk, melyek az ENDF (*Evaluated Nuclear Data File*) hatáskeresztmetszet táblázatból származó ACE (*A Compact ENDF*) formátumban adhatóak meg. Ez a dokumentum egy használati segédlet a verziókövető rendszerhez valamint az alkalmazás fordításához és futtatásához. Tartalmazza a program futtatásakor megadható kapcsolókat, a használt paraméterek, valamint a geometria és az anyagi leíró fájlok leírását.

## 1. SVN és Trac használata

### 1.1. Subversion

A Subversion (SVN) egy verziókövető rendszer, mellyel fejlesztés során követni tudjuk a változásokat, illetve mivel minden korábbi verziót (**revision**) tartalmaz akármikor vissza lehet térti egy régebbi fejlesztési állapothoz. A **repository** az, ami fent van a szerveren és a projekt minden verziója el van tárolva. **Working copy**-nak nevezzük ennek egy kicheckoutolt változatát, ami a felhasználó könyvtárában található, és a projekt egy konkrét verzióját tartalmazza.

Az *update* és *status* parancsokra a fájlokat a következő betűkkel jelölheti az svn:

- **M** : a fájl módosítva van és még nincs committolva (Modified).
- **U** : a fájlnak újabb verziója volt a repository-ban és frissítve lett (Update).
- **G** : a fájlt módosította a felhasználó, de a repositoryban is egy újabb verzió volt, a két változás sikeresen össze lett fésülve (merGe).
- **C** : konfliktus van a verziók között (Conflict).
- **A** : a fájl hozzá lett adva (Add).
- **D** : a fájl törölve lett (Deleted).

Legtöbb svn parancs egy vagy több fájl- vagy könyvtárnevet vár paraméterül, ha nem adunk meg neki, akkor az aktuális könyvtárral dolgozik. Ha az argumentumok között szerepel könyvtár, akkor azt rekurzívan dolgozza fel, ezt általában a *-N* kapcsolóval kerülhetjük el (például ha hozzá szeretnénk adni egy könyvtárat, de nem az összes benne lévő fájlt, akkor először egy *svn add -N könyvtár* parancsal hozzáadjuk magát a könyvtárat és utána benne egy külön *svn add fájl1 fájl2 ...* parancsal a kívánt fájlokat). Néhány esetben a nem rekurzív viselkedés az alapértelmezett (pl. revert), ilyenkor a *-R* kapcsolóval lehet kérni, hogy mégis az legyen.

A legfontosabb parancsokról röviden:

- **add:** új fájlok hozzáadása a working copy-hoz, majd egy commit-tal belekerülnek a repositoryba.
- **checkout:** egy új working copy létrehozása. A *-r* kapcsolóval lehet megadni, hogy melyik verziót checkout-olja ki.
- **commit:** a working copyban lévő változások feltöltése a repositoryba. A *-m* kapcsolóval lehet megadni a commit üzenetet, ha nem adjuk meg egy editort kapunk. Az editor átállítható a *-editor-cmd* kapcsolóval vagy az *EDITOR* környezeti változóval.
- **copy:** egy fájlból vagy könyvtárból másolatot lehet készíteni. A másolat örökli az eredeti történetét. Ezt használjuk az svn-ben a *branch*-ek és *tag*-ek létrehozására is.
- **delete:** fájlok vagy könyvtárak törlése, a fájlok ekkor csak meg lesznek jelölve és commit-nál törlődnek a working copy-ból.
- **diff:** változások megjelenítése. Alapértelmezésben a working copy-t hasonlítja össze az azonos módosítatlan verzióval, vagyis a lokális változtatásokat jeleníti meg. A *-r* kapcsolóval lehet megadni, hogy melyik verzióval hasonlítsa össze. Két kettősponttal elválasztott revision esetén az azok közötti különbségeket adja meg. Igazi revision számok helyett lehet írni a következőket:
  - *HEAD*: a repositoryban lévő legutolsó.
  - *BASE*: a working copy alapjául szolgáló változat (azaz a legutolsó update ill. commit változata).
  - *REV*: az előző változat, vagyis a legutóbbi commit módosításai.
  - *dátum*: egy megadott dátumkor érvényes változat.

- **log**: commit üzenetek listája, *-v* kapcsolóval kiírja, hogy az adott verzióinál milyen fájlok változtak. Working copy nélkül is megnézhetjük a legutolsó változat log-jait, ha paraméterül egy repository-beli teljes útvonalat adunk meg.
- **move**: fájl vagy könyvtár átnevezése, ekvivalens egy **copy** és **remove** parancssal.
- **resolved**: conflict feloldásának jelzése. Törli a conflictnál keletkezett különböző változatokról készült mentési fájlokat.
- **revert**: fájl visszaállítása olyan állapotra, amilyenben a working copy alapjául szolgáló változatban volt (BASE revision).
- **status**: a working copy állapotát írja ki a BASE revisionhöz képest. A *-v* kapcsolóval több információt ír ki (pl. a revision számokat). Alapértelemezettként ez a parancs nem kérdez le a hálózaton semmit, viszont *-u* kapcsolóval lekérdezhető, hogy a repository-ban van-e újabb változat (ezt egy *\*-gal* jelzi).
- **update**: szinkronizálja a working copy-t a megadott revision-höz (ami, ha nincs megadva, akkor a HEAD, azaz a legfrissebb változat).

## 1.2. Trac

A Trac egy felület az SVN-hez, amivel böngészőn keresztül is megtekinthetjük az SVN tartalmát.

A trac rendszer legfontosabb része a ticket kezelés, ha a programmal kapcsolatban fellépett egy hiba, vagy létre szeretnénk hozni egy új feladatot, akkor erről ticketet kell felvenni, melyben leírhatjuk, hogy mi a pontos feladat, és hozzárendelhetjük a feladatot ahoz a felhasználóhoz, aki vel szeretnénk elvégeztetni azt. Az ezzel kapcsolatos kódmodosításokat ehhez a tickethez rendelhetjük, így átláthatóbbá válik a fejlesztés, és minden az adott feladathoz köthető módosítás egy helyen látható. Ha egy commit-ot egy tickethez szeretnénk rendelni, akkor az üzenetben szerepelnie kell a következőnek *refs #1*, ahol az 1-es szám jelöli a ticket számát.

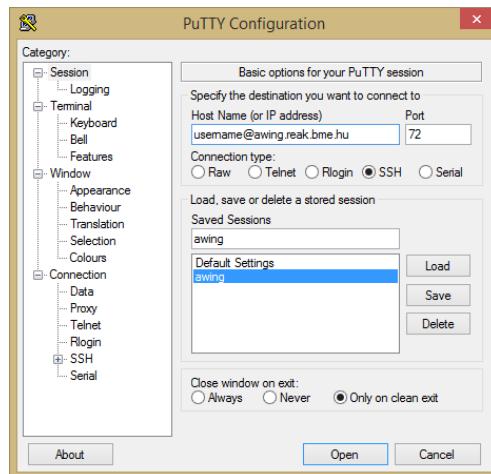
A trac felület lapjairól röviden:

- **Wiki**: projektünk fontos adatait jegyezhetjük fel, például fordítás, futtatás, paraméterek, megbeszélések. A lap alján az *Edit this Page* gombra kattintva kezdhetjük meg az oldal szerkesztését, a *WikiFormatting* linken részletes információt kaphatunk a formázási jelölésekkről.

- **Timeline:** tulajdonképpen egy napló, ahol sorrendben láthatunk minden, a projektet érintő változtatást, szűrhetünk időintervallumra vagy felhasználóra.
- **Browse Source:** a repository-k tartalmait böngészhetjük itt.
- **View Ticket:** a jelentéseket (report) tudjuk itt kezelni, ticketeket kérdezhetünk le többfajta kritérium szerint.
- **New Ticket:** új ticketet lehet felvinni a rendszerbe, lehetőség van előnézetének megtekintésére és mellékletek csatolására is. Fontos, hogy miután létrehoz a felhasználó egy ticketet, meg kell nyitni és hozzárendelni valakihez (assign) különben nem lesz aktív.

### 1.2.1. Awing belépés

Windowsról a putty [1] programmal tudunk parancssori kapcsolatot létesíteni, Host Name: username@awing.reak.bme.hu, Port 72, Connection type: SSH.



1. ábra. Putty beállítás az awing szerverhez.

A szerver elérhető grafikus felülettel is, ehhez a nomachine négyes verzióját [2] kell telepíteni. A beállításokban pedig a következőket kell megadni: Host: awing.reak.bme.hu, Port: 72, Protocol: SSH, csatlakozáskor pedig az alábbiakat kell kiválasztani:  
*<New Virtual desktop or custom session>*  
*"Create a new Ubuntu virtual Desktop".*

Linux operációs rendszeren terminálból elérhető a gép ssh-val az `ssh -p 72 -C username@awing.reak.bme.hu` parancssal.

A trac rendszer külső hálózatból is elérhető a `http://awing.reak.bme.hu/GUARDYAN` címen.

Name	Size	Rev	Age	Author	Last Change
5 branches/qt	5 97.9 KB	5 5 days	5 days	gronai	qt verzió 2 host es device kod szerebrolva, refs #1
5 branches/qt2	5 604 bytes	5 5 days	5 days	gronai	qt verzió 2 host es device kod szerebrolva, refs #1
4 Doxyfile	4 102 bytes	4 5 days	5 days	gronai	qt project letrehozva, refs #1
4 kernelinterfaces.h	4 102 bytes	4 5 days	5 days	gronai	qt verzió 2 host es device kod szerebrolva, refs #1
4 main.cpp	4 3.0 KB	4 5 days	5 days	gronai	qt verzió 2 host es device kod szerebrolva, refs #1
4 memoryobject.cpp	4 1.6 KB	4 5 days	5 days	gronai	qt verzió 2 host es device kod szerebrolva, refs #1
4 memoryobject.h	4 1.6 KB	4 5 days	5 days	gronai	qt verzió 2 host es device kod szerebrolva, refs #1

2. ábra. Guardyan Trac

Bejelentkezés után megtekinthetők a kódverziók a *browse source* fül alatt a *TDMCC* mappában.

## 2. Fordítás és futtatás

### 2.1. Checkout

Egy *working copy* létrehozásához awingen egy mappát kell készíteni a projektnek, belelépni a mappába majd kiadni a következő parancsot:

```
svn co http://awing.reak.bme.hu/svn/TDMCC_SDK/trunk .
```

Ha egy másik ágat szeretnénk fejleszteni, akkor a *TDMCC\_SDK* utáni részt kell módosítani. Ebben a mappában a fentebb leírt parancsokkal használható az SVN. A fájlok letöltése után hozunk létre egy *libdir* mappát, ide fognak kerülni a fordítás során keletkező fájlok.

### 2.2. A környezeti változók beállítása

A forrásfájlok között található egy *set\_env* fájl, mellyel be kell állítanunk fordításhoz és futtatáshoz a környezeti változókat, itt adhatjuk meg a használni kívánt CUDA verzió elérési útját. Futtatás és fordítás előtt ki kell adni a `./set_env` parancsot.

### 2.3. Függőségek

A fejlesztés linux alapú operációs rendszeren folyik, jelenleg az Ubuntu 18.04 verzióját használjuk. A fordításhoz és futtatáshoz a következő függőségekre van szükség:

CUDA: 10.0

NVIDIA driver: 410.57

GCC: 7.3.0

Qt: 5.9.5

### 2.4. Fordítás

A környezeti változók beállítása után (amely az adott terminálra vonatkozik) indíthatunk egy *Qt Creator*-t [3] melyben szerkeszthetjük, fordíthatjuk és debugolhatjuk a programot.

Parancssorból dolgozva a *rebuild* fájlt használva és a `./rebuild` parancsot kiadva fordíthatjuk újra a kódot. Ez jelenleg négy parancsot tartalmaz:

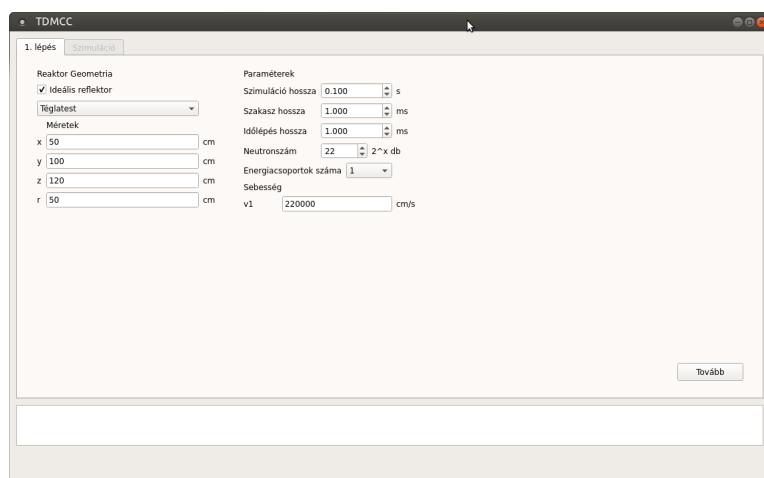
- **colormake -f Makefile clean** : törli a lefordított állományokat

- **colormake -f Makefile distclean** : törli a generált Makefile-okat
- **qmake -r -spec linux-g++-64 CONFIG+="create\_pc create\_prl linkq\_pkgconfig"** : újra legenerálja a Makefile-okat a változtatások alapján. A CONFIG után az idézőjelbe egy *debug*-ot beszűrva a CPU és a GPU kód is debug módban fordítható.
- **colormake -f Makefile -j 1** : lefordítja a programot az új Makefile-ok alapján. A *-j* opcionál megadható a fordítónak, hogy hány CPU szálat szeretnék használni.

A *colormake*, mint ahogy a neve is mutatja színezve jelöli a fordítás lépeit, így az *error*-ok és a *warning*-ok könnyebben megtalálhatóak.

## 2.5. Branches - qtZeroVariance

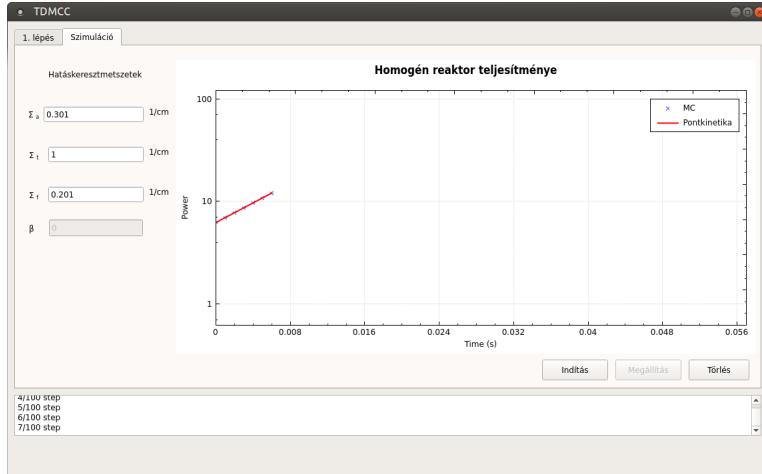
Ebben a fejlesztési ágban a gyakorlatban is működőképes szóráscsökkentési eljárás létrehozása a cél. A GPU-n történő reaktordinamikai számítások esetében olyan szóráscsökkentő eljárások jöhettek szóba, ahol részecskeprojektoriák nem ágaznak el. Az alkalmazás jelenleg homogén gömb, henger és téglalap alakú reaktorokat képes kezelni, a felületeken pedig megadható a határfeltétel, mely lehet vákuum és ideális reflektor. A Grafikus kezelői felület első lapján állíthatjuk be a geometriai méreteket, és az algoritmus néhány paraméterét, ezek láthatóak a 3. ábrán.



3. ábra. Grafikus kezelői felület: beállítások.

A *Tovább* gombra kattintva a második lapon indítható el a szimuláció, és adhatóak meg a hatáskeresztmetszetek és a későneutron hányad. A szimuláció az *Indítás* gomb megnyomásával kezdhető el, a *Megállítás* gombbal

szüneteltethető, ekkor módosíthatjuk a hatáskeresztmetszeteket majd az *Indítás*-ra kattintva folytathatjuk a szimulációt. A grafikonon a teljesítmény látható az idő függvényében, kékkel a szimulált érték, pirossal a számolt pontkinetikai megoldás eredménye.



4. ábra. Grafikus kezelői felület: szimuláció.

Az alkalmazás neve *TDMCCAApp64*, melynek *-f* kapcsolójával a program kivezetett beállításait adhatjuk meg. Ez egy parancssori alkalmazás, azonban a *--gui* kapcsolóval grafikus kezelői felülettel indíthatjuk el a programot. A futtatáshoz a

*./TDMCCAApp64 -f neutrontransport.cfg --gui*

parancsot kell kiadni, ahol a *-f* kapcsoló után a beállításokat tartalmazó fájl neve áll. A forráskódok mellett található egy *neutrontransport.cfg* minta fájl, mely tartalmaz egy lehetséges beállítást:

- *output\_file\_name = output.txt*  
Időlépéseként a teljesítményt és annak szórását tartalmazó fájl.
- *number\_of\_neutrons = 4194304*  
A szimulálandó neutronok száma, jelenleg kettő egész számú hatványa lehet.
- *particles\_per\_thread = 8*  
A GPU-n egy szálon szimulált neutronok száma.
- *simulation\_time = 1.0*  
Szimuláció hossza másodperc egységben.

- $length\_of\_time\_step = 5e-4$   
Egy időlénzs hossza másodperc egységben.
- $length\_of\_time\_step\_feedback = 5e-4$   
Egy szakasz hossza másodpercben.
- $sigma\_a = 0.16382$   
Abszorpciós hatáskeresztmetszet  $\frac{1}{cm}$  egységben.
- $sigma\_t = 1.0$   
Teljes hatáskeresztmetszet  $\frac{1}{cm}$  egységben.
- $sigma\_f = 0.25$   
Hasadási hatáskeresztmetszet  $\frac{1}{cm}$  egységben.
- $beta = 0.0065$   
Későneutron hányad.
- $lambda = 0.1115$   
Későneutron csoport bomlási állandója  $\frac{1}{s}$  egységben.
- $length\_x = 5.0$   
Geometria mérete az x-tengely mentén centiméter egységben.
- $length\_y = 10.0$   
Geometria mérete az y-tengely mentén centiméter egységben.
- $length\_z = 12.0$   
Geometria mérete az z-tengely mentén centiméter egységben.
- $length\_r = 50.0$   
Geometria radiális mérete centiméter egységben.
- $splitlimit = 400.0$   
Trajektória felhasításának határa.
- $roulettelimit = 10.0$   
Orosz rulett határa.
- $roulette\_restore\_value = 10.0$   
Orosz rulett értéke.
- $device\_index = -1$   
GPU eszköz indexe, -1 esetén automatikusan választ a szabad GPU-k közül.

- *volume\_size\_x = 64*  
Térfogat x-irányú felbontása.
- *volume\_size\_y = 64*  
Térfogat y-irányú felbontása.
- *volume\_size\_z = 64*  
Térfogat z-irányú felbontása.
- *create\_volume = 0*  
Neutronsűrűség térfogati eloszlásának kimentése. Ha az értéke 1, akkor szakaszonként kimenti a program.
- *velocity\_group1 = 2.2e5*  
Egy neutroncsoport esetén a neutron sebessége  $\frac{cm}{s}$  egységben.
- *velocity\_group2 = 1.95e9*  
Kétcsoport közelítésben a második csoport neutronjainak sebessége  $\frac{cm}{s}$  egységben.
- *create\_histogram = 0*  
Hisztogram készítési opció. Ha az értéke 1 akkor szakaszonként fájlba menti a program a neutronok súlyából készített hisztogramot.
- *histogram\_size = 1024*  
A hisztogram osztásainak száma.
- *source\_type = 0*  
Forrás indítása egyenletes eloszlásból (0) vagy koszinuszosból (1).
- *reflector = 1*  
Külső felület reflektáló (1), vákuum (0).
- *reactor = Box*  
Reaktor geometria alakja: *Box* (téglatest), *Sphere* ( gömb) vagy *Cylinder* (henger) lehet az értéke.
- *print\_history\_period = 10*  
Neutron history kiírásának periódusa időlépés egységekben.
- *history\_collision\_length = 50*  
Egy history-ban kigyűjtött láncok ütközési hossza.
- *history\_time = 1.0e-4*  
Egy history maximális időbeli hossza másodperc egységben.

- *number\_of\_energy\_groups = 2*  
Energia csoportok száma, 1 vagy 2 lehet az értéke.
- *print\_history\_start = 99*  
Az értéke megmondja hogy a history kiírása hányadik szakasztól kezdődjön.

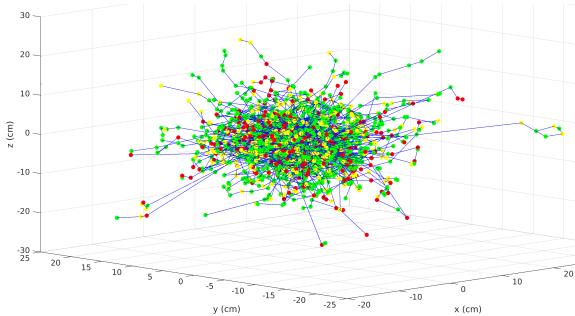
A paraméterek sorrendje nem számít, a "#" jellel hagyhatunk figyelmen kívül egy beállítást, ekkor a program az alapértelmezett értékeket fogja használni az adott paramétere, az egyenlőségjel megadása kötelező.

Az alkalmazás kimenetei:

- *output.txt*  
Egy szöveges fájl, mely három oszlopot tartalmaz, az első oszlopban található a szakasz kezdetének időpontja a másodikban a leadott teljesítmény, a harmadikban pedig a teljesítmény szórása.
- *volume\_t\*.raw*  
A neutronsűrűség térbeli eloszlása a .cfg fájlban megadott *volume\_size\_x*, *volume\_size\_y*, *volume\_size\_z* paramétereknek megfelelően.
- *histogram\_t\*.txt*  
A súlyokból képzett *histogram\_size* méretű hisztogramot tartalmazó fájl.
- *history\_t\*.raw*  
Bináris fájl a neutronok történetéről. A fájl egy fejléccel kezdődik mely tartalmazza a neutronok számát (*unsigned long long*) és az egy neutronhoz tartozó tulajdonságok számát (*unsigned int*).

A fejléc után az abban megadott számú neutron adatai következnek a következő sorrendben: neutron lánc indexe (*unsigned int*), reakció típusa (*char*), x-koordináta (*float*), y-koordináta (*float*), z-koordináta (*float*), időpont (*float*), súly (*float*). A reakció típusa azt mondja meg, hogy a neutron az adott lépésben milyen reakcióban vett részt, hasadásban (*f*), elasztikus szórásban (*e*), inelasztikus szórásban (*i*) vagy prekurzorrá vált (*p*).

Az 5. ábrán  $^{235}U$  gömb esetén a  $t = 0s$  időpillanatban  $1eV$  energiájú neutronokat indítottunk az origóból. 500 neutron első nyolc reakciója látható az ábrán, zölddel jelölve a rugalmas szórást, pirossal a hasadást, sárgával minden egyéb reakciót.



5. ábra. Zölddel  $MT=2$ , pirossal  $MT=18$ , sárgával jelölve minden egyéb reakciót.

## 2.6. Branches - sourceconvergence

A forráskonvergencia fejlesztéséhez használt ág, melynek jelenlegi paraméterei és kimenetei megegyeznek a 2.5. fejezetben leírtakkal.

## 2.7. Branches - realistic

Ennek a fejlesztési ágnak a célja, hogy ne csak homogén anyagi eloszlású egyszerű geometriákat tudjon kezelni az alkalmazás, hanem realisztikus hatáskezelőmetszeteket beolvasva azokat használja egy bonyolultabb geometriában, melyet felületekkel definiálhatunk.

Ebben az ágban az alkalmazás neve *GuardyanApp*, mely ugyanúgy rendelkezik a *--gui* kapcsolóval, *-f* után *XML* formátumban adhatjuk meg az eddigi *.cfg* fájlt, valamint ezek mellett van egy *-m* az anyagok és egy *-g* a geometriai xml leíró megadására. A futtatáshoz a  
*./GuardyanApp -f settings.xml --gui -g geometry.xml -m materials.xml*  
parancsot kell kiadni. A grafikus kezelői felület annyiban módosult, hogy a geometriai és az anyagi tulajdonságok megadási lehetőségét levettük a gui-ról.

Listing 1. settings.xml

```
<settings>
    <output_path>results</output_path>
    <number_of_neutrons>1048576</number_of_neutrons>
    <particles_per_thread>8</particles_per_thread>
    <simulation_time>1e-7</simulation_time>
    <length_of_time_step>1e-7</length_of_time_step>
    <length_of_time_step_feedback>1e-7</length_of_time_step_feedback>
    <device_index>0</device_index>
```

```

<initial_energy>0.1</initial_energy>
<xs_data_dir>ENDF-B-VII.1-neutron-293.6K</xs_data_dir>
<volume>
    <create value="1"/>
    <size x="128" y="128" z="128"/>
    <length x="200.0" y="200.0" z="200.0"/>
</volume>
<histogram>
    <create value="0"/>
    <energy size="2048"/>
    <weight size="2048"/>
</histogram>
<history start="999" period="0" length="2" time="2"/>
</settings>

```

Ahogy fentebb látható, a korábban leírt paraméterek közül itt is léteznek nagy részük, de kissé módosítva, továbbá megadható még két új paraméter:

- *xs\_data\_dir*  
Hatáskeresztmetszet adatokat tartalmazó mappa elérési útja.
- *initial\_energy*  
A neutronok kezdeti energiája MeV egységben.

Az előző fejezetben ismertetett fájlok ezen az ágon is használhatóak, ezeken kívül, mivel itt már összetettebb geometria található, a térbeli anyageloszlás kimentésére is van lehetőség.

- *material\_volume.raw*  
Anyagindexeket tartalmazó térbeli eloszlás a *settings.xml* fájlban megadott *volume* paramétereknek megfelelően.

## 2.8. Branches - eventbased

A *realistic* ágból lett létrehozva, de azóta sok átalakításon és javításon esett át. Megtalálható benne a régi *history* alapú kernel, de lehetőség van az úgynevezett *event based* szimuláció futtatására. Az esemény alapú algoritmus lényege, hogy minden különböző ACE törvényre külön kernel lett létrehozva, így a neutronok életét lépéseként követhetjük. Ezen az ágon a fésülést is GPU-n történik, a korábban bevezetett populáció kontroll pedig már nem kapcsolható, ennek részletes ismertetése a 8.1. fejezetben található. Újdon-ság továbbá a  $k_{eff}$  és a  $k_d$  becslések, valamint a majoráns mesh használata.

- *event\_based*

Értéke *on* ha esemény alapú, *off* ha history alapú szimulációt szeretnénk futtatni.

- *distribution*

A *period* után adhatjuk meg, hogy hány időlépésenként szeretnénk kiírni a populációt, az *escaped* után pedig az *on* vagy *off* kapcsolóval adhatjuk meg, hogy a geometriát elhagyó, vagy a bent maradó neutronokat írjuk ki.

A fájl eleje tartalmazza, hogy hány prompt aki reakcióban részt vesz a következő szakaszban, hány prompt aki nem veszt részt, és hány prekurzor van. Ezután a soronként az egyes neutron adati következnek a neutron index után: ACE törvény száma, az adott törvény indexe, a reakció indexe, az izotóp indexe, a hely koordináták, irányvektor, neutron ideje, neutron súlya, neutron energiája.

- *combing\_method*

Fésülési módszer, melynek jelenlegi értékei lehetnek *equalweight* vagy *adjointbased*.

- *Woodcock*

Woodcock-módszer paraméterei: *raytracing=on biased=on*

- *physics*

A transzport során használt fizikai modellek egy része kapcsolható, ezek a következők: *unresolved\_resonances*, *delayed\_neutrons*, *s\_alpha\_beta*, lehetséges értékei *on* és *off*.

- *number\_of\_majorants*

A generált majoránsok energiacsoportjainak száma.

- *number\_of\_adoints*

A generált adjungáltak energiacsoportoknak a száma.

- *material\_samples*

A majoráns és a cellagyorsítás során felhasznált mintaszám voxelenként.

- *adjoint\_samples*

Adjungált generálásban felhasznált minták száma voxelenként.

- *max\_universe\_depth*

Cella keresés gyorsításánál használt algoritmus megengedett legnagyobb mélysége.

- *point\_source*

Értéke *on* esetén a  $(0, 0, 0)$  pontból indítjuk a neutronokat, *off* esetén a *material\_volume*-ban megadott térfogatból egyenletes eloszlással soroljuk az induló neutronok pozícióját.

- *time*

A szimulációban használt idők másodpercben, *start* után adhatjuk meg az első szakasz kezdetének időpontját. A *simulation* a szimuláció hossza, *source\_convergence* a forráskonvergencia hossza, *neutronics\_step* egy időlépés hossza, *adjoint\_step* adjungált generálás ideje.

- *k\_eff\_estimator*

A *k\_eff* becslés, lehetséges értékei: *on* vagy *off*.

- *k\_eff\_cycles*

A *k\_eff* becslésnél használt *inactive* és *active* ciklusok száma.

- *random\_seed*

Véletlenszám generátor kezdőértéke.

- *source\_file*

Egy korábbi neutronpopulációt tartalmazó fájl, melyből a szimuláció kezdjük. Fontos, hogy jelenleg a két időlépésnek és neutronszámnak meg kell egyeznie.

- *material\_volume*

- *majorant\_volume*

- *adjoint\_volume*

- *qz\_volume*

- *universe\_level\_volume*

Minden térfogat esetében meg kell adni minden irányban a felbontást, a minimum értéket és az osztásközt.

Listing 2. volume

```
<create period="1000"/>
<size x="128" y="128" z="128"/>
<min x="-42.0" y="-42.0" z="-42.0"/>
<step x="0.65625" y="0.65625" z="0.65625"/>
```

Alkalmazás kimenetei:

- majorant\_e0.raw
- adjoint\_e0.raw

További újdonság, hogy a *material volume.raw* fájlba *singed int* értékek kerülnek, melyek a belső anyagindexet jelentik.

## 2.9. Branches - thermohydraulics

A thermohidraulika fejlesztésére létrehozott ág.

## 2.10. Trunk

A főág, ez tartalmazza a legfrissebb tesztelt verziót.

## 2.11. Tags

A fejlesztés során tesztelendő kódverziókat tartalmazó ág. Az adott tag neve a létrehozás napját tartalmazza, és hogy azon a napon hányadik verzió.

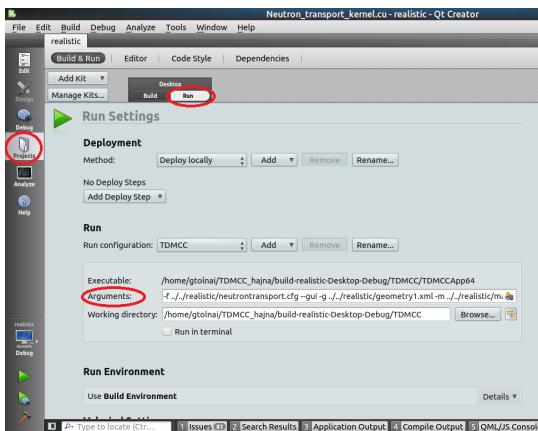
## 2.12. Qt

A Qt grafikus alkalmazások platformfüggetlen fejlesztésére szolgáló fejlesztői környezet, melynek osztályai segítségével egyszerűen hozhatók létre felhasználói felületek. A Qt környezet a C++ nyelvet **slot** és **signal** tulajdonságokkal bővíti, ezek segítségével oldható meg az objektumok közötti kommunikációt. A *signal* lehet például egy billentyű megnyomása, vagy az egér mozgatása, egy *slot* pedig az adott *signal* megléte esetén végrehajtandó programrészlet. A Qt fejlesztői környezetnek része egy grafikus alkalmazás is, mellyel a felhasználói felület egyszerűen megadható, így nem szükséges minden gombot és menüsorat szövegesen programozni [5].

A forrásfájlok között találhatóak a \*.pro projektleíró fájlok. Ezekben adhatjuk meg a használni kívánt forráskódokat tartalmazó fájlokat, kezelhetjük

a függőségeket, valamint megadhatjuk a fordítónak szánt beállításokat is. A projekt fájl tartalmazza továbbá a GPU kód fordításához használt *nvcc* beállításait is.

A Qt Creator indítása terminálból történik a következő parancssal: *qtcreator projekt.pro -noload Welcome -noload QmlProfiler -noload QmlDesigner*, ahol a *projekt.pro* helyére az adott ágon található *.pro* fájl nevét kell megadni. Indítás előtt a terminálban ki kell adni az adott branch-ben a *./set\_env* parancsot, így beállítva a környezeti változókat.



6. ábra. QtCreatorban az alkalmazás paraméterinek megadása.

A 6.ábrán látható módon, a bal oldali menüsorban a *Projects*-re, majd a *Run*-ra kattintva az *Arguments* mezőben adhatjuk meg az alkalmazás beállításait. Ezután *debug* módban fordítva az alkalmazás futtatható és a host oldali kód debugolható.

## 2.13. Doxygen

Dokumentációkészítéshez hasznos segédeszköz a doxygen, mely a program forráskódja alapján képes elkészíteni annak dokumentációját. Az irodalomjegyzékben található [6] manuálban részletes leírás található a kommentek formátumáról.

A forráskód mellett található egy *Doxyfile* nevű konfigurációs fájl, melyben megadhatjuk a generálás beállításait. Az alapértelmezett beállításokhoz képest a következő módosításokat tartalmazza:

- PROJECT\_NAME TDMCC
- PROJECT\_BRIEF Time Dependent Monte Carlo Code

- OPTIMIZE\_OUTPUT\_FOR\_C = YES
- SOURCE\_BROWSER = YES
- EXTRACT\_ALL = YES
- SORT\_BRIEF\_DOCS = YES
- FILE\_PATTERNS = \*.h \*.hpp \*.cpp \*.cu \*.cuh
- RECURSIVE = YES
- INLINE\_SOURCES = YES
- REFERENCED\_BY\_RELATION = YES
- REFERENCES\_RELATION = YES
- HTML\_DYNAMIC\_SECTIONS = YES
- GENERATE\_TREEVIEW = YES
- MACRO\_EXPANSION = YES
- CALL\_GRAPH = YES
- CALLER\_GRAPH = YES
- MAX\_DOT\_GRAPH\_DEPTH = 4
- DOT\_MULTI\_TARGETS = YES

A dokumentáció elkészítéséhez *doxygen Doxyfile* parancsot kell kiadni, ezzel html és latex formában készül el a dokumentáció, a html esetén az index.html fájl vezet a dokumentáció kezdőoldalára.

### **3. Realisztikus geometria**

Annak érdekében, hogy az alkalmazás egy valós reaktor geometriáján is képes legyen szimulációt végezni, meg kell teremteni a geometria leíróhoz szükséges eszközöket. Ezek bemutatása található ebben a fejezetben.

#### **3.1. Felületek**

Első lépésként a geometria felépítéséhez felületeket kell definiálnunk, a program jelenlegi verziójában támogatott a gömb, sík, végletes henger, kúp, törusz illetve ezek néhány speciális esete, melyeket az 1. táblázat tartalmaz.

Felület	jele	$S(x,y,z)$
x-tengelyre merőleges sík	px	$x - x_0$
y-tengelyre merőleges sík	py	$y - y_0$
z-tengelyre merőleges sík	pz	$z - z_0$
általános helyzetű sík	p	$Ax + By + Cz - D$
x-tengellyel párhuzamos origó középpontú henger	cx	$y^2 + z^2 - r^2$
y-tengellyel párhuzamos origó középpontú henger	cy	$x^2 + z^2 - r^2$
z-tengellyel párhuzamos origó középpontú henger	cz	$x^2 + y^2 - r^2$
x-tengellyel párhuzamos henger	c/x	$(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 - r^2$
y-tengellyel párhuzamos henger	c/y	$(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2 - r^2$
z-tengellyel párhuzamos henger	c/z	$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 - r^2$
origo középpontú gömb	so	$x^2 + y^2 + z^2 - r^2$
x-tengely közepű gömb	sx	$(x - x_0)^2 + y^2 + z^2 - r^2$
y-tengely közepű gömb	sy	$x^2 + (y - y_0)^2 + z^2 - r^2$
z-tengely közepű gömb	sz	$x^2 + y^2 + (z - z_0)^2 - r^2$
áltanános helyzetű gömb	s	$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 - r^2$
ellipszoid, hiperboloid, paraboloid	sq	$A(x - x_0)^2 + B(y - y_0)^2 + C(z - z_0)^2 + 2D(x - x_0) + 2E(y - y_0) + 2F(z - z_0) + G$
kúp az x-tengelyen	kx	$\sqrt{y^2 + z^2} - t(x - x_0)$
kúp az y-tengelyen	ky	$\sqrt{x^2 + z^2} - t(y - y_0)$
kúp az z-tengelyen	kz	$\sqrt{x^2 + y^2} - t(z - z_0)$
x-tengellyel párhuzamos kúp	k/x	$\sqrt{(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} - t(x - x_0)$
y-tengellyel párhuzamos kúp	k/y	$\sqrt{(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2} - t(y - y_0)$
z-tengellyel párhuzamos kúp	k/z	$\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} - t(z - z_0)$
x tengellyel párhuzamos tórusz	tx	$\frac{(x-x_0)^2}{B^2} + \frac{\left(\sqrt{(y-y_0)^2+(z-z_0)^2}-A\right)^2}{C^2} - 1$
y tengellyel párhuzamos tórusz	ty	$\frac{(y-y_0)^2}{B^2} + \frac{\left(\sqrt{(x-x_0)^2+(z-z_0)^2}-A\right)^2}{C^2} - 1$
z tengellyel párhuzamos tórusz	tz	$\frac{(z-z_0)^2}{B^2} + \frac{\left(\sqrt{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}-A\right)^2}{C^2} - 1$

1. táblázat: Jelenleg támogatott felületek típusai.

A tórusz kivételével minden felülethez megadható továbbá egy transzfor-

máció is. A felületek paramétereinek beolvasása után azokat átalakítjuk az általános kvadratikus felület paraméterivé annak érdekében, hogy a kernelekben minden felületet egységesen kezelhessünk.

$$S(x, y, z) = Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gx + Hy + Jz + K$$

A kúp és a tórusz két speciális felület, melyet külön kell kezelnünk. Kúp esetén a kvadratikus alak ugyanis két kúpot ír le, egyet melynek forgástengelye pozitív irányba mutat, és egyet, melyik negatív irányba. A leírókban általában csak az egyikre van szükség, ezért a paraméterei után opcionálisan megadható 1 vagy -1 ha csak egyik kúpra van szükség. A tórusz esetén az a probléma, hogy nem írható fel kvadratikus alakban, ha kibontjuk az egyenletet, akkor kapunk egy extra gyökös tagot, melynek három paramétere van.

$$-\frac{2A}{C^2} \sqrt{(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} \quad (1)$$

Mivel a tórusz felírásában nincsenek vegyes tagok, ezért ezeket a konstansokat a vegyes tagok együtthatóiban tároljuk, és ezzel külön számolunk, így a paraméterek száma ugyanannyi, de nem adható meg általános helyzetű tórusz, és nem is forgatható.

### 3.2. Cellák

A felületek megadása után a cellákat kell definiálnunk. Ehhez minden cellára meg kell adni, hogy melyik felületek határolják, ha a cella az adott felületen belül található, akkor negatívként kell megadni a felület indexét, ellenkező esetben pozitívként. A celláknak meg kell adni az anyag indexét, melyet az anyagi leíróban definiáltunk, a cella anyaga lehet továbbá *void*, ekkor a neutron kölcsönhatás nélkül megy át az anyagon és *dead*, akkor a cellába érkező neutron meghal (külvilág).

A neutronok térbeli koordinátájának ismeretében meg kell határoznunk, hogy melyik cellában található. Ehhez az algoritmus a cellát határoló összes felületen végigmegy és behelyettesíti a koordinátákat a felületet leíró függvénybe, majd az így kapott értékek és a definiált felületek cellára vonatkozó előjele alapján megkapjuk melyik cellában található a részecske.

#### Logikai műveletek

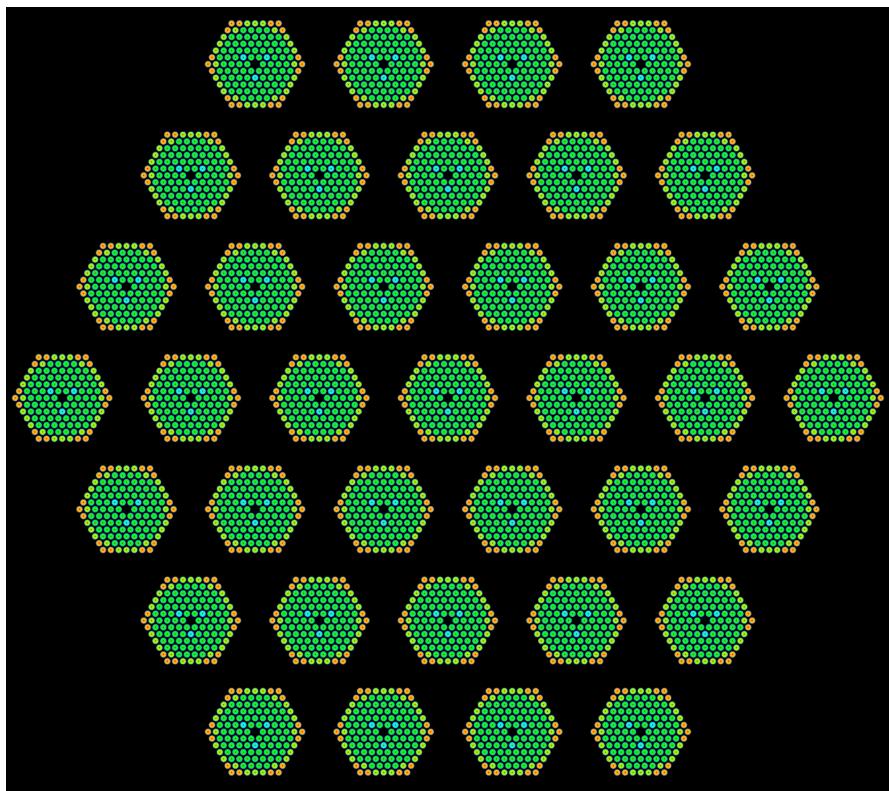
A cellát határoló felületek megadásánál a felületek között alapértelmezett metszetet tételezünk fel, de használható a ":" az unió definíciójára és a "#" a komplementerre, illetve "(" zárójelezés is megengedett.

### 3.3. Univerzumok

Lehetőség van úgynevezett univerzumokat definiálni, melyek egy vagy több cellából építhetők fel, és minden le kell, hogy fedjék a teljes teret. Ezekkel tölthetők fel más cellák, vagy rácselemek.

### 3.4. Rácsok

Jelenlegi verzióban egyenlő osztású  $x-y$ ,  $x-z$ ,  $y-z$  síkú négyszög rács illetve  $x-y$  síkú kétféle állású hatszögrács adható meg.



7. ábra. Hatszögrácsba rendezett hengereket tartalmazó hatszögrácsok meteszeti képe.

### 3.5. Transzformációk

Transzformációk esetén az indexükön kívül az eltolás vektort és a forgatás mátrixot adhatjuk meg. A transzformáció hathat felületre és egy cellára.

### 3.6. Geometria leíró

A cellák és felületek megadási módja hasonló a Serpent [8] által használittal, az eltérés hogy a saját projektünkben *xml* fájlból adhatóak meg. Az alábbiakban egy példa látható a geometriai leírónak, melyben megtalálható az összes különböző megadási mód.

Listing 3. geometry.xml

```
<geometry>
    <surface id="1" type="cz" transform="301" coeffs="40.000"/>
    <surface id="2" type="c/z" coeffs="5.000 17.32 10.0"/>
    <cell id="2" material="13" surfaces="1" universe="53"/>
    <cell id="3" material="dead" surfaces="-2 -1" universe="58"/>
    <cell id="4" surfaces="-1" fill="58" transform="4"/>
    <transformation id="4" displacement="0.2 0.2 0.2"
        rotation="300 210 -90 390 300 -90 90 90 0"/>
    <transformation id="0" displacement="0 0 0"/>
    <lattice id="58" type="hexx" dimension="9 9" pitch="0.1 0.1"
        universes =
            58 58 58 58 58 58 58 58 58
            58 58 58 58 53 53 53 53 58
            58 58 58 53 53 53 53 53 58
            58 58 53 53 53 53 53 53 58
            58 53 53 53 53 53 53 53 58
            58 53 53 53 53 53 53 58 58
            58 53 53 53 53 53 58 58 58
            58 53 53 53 58 58 58 58 58
            58 58 58 58 58 58 58 58 58"
        transform =
            0 0 0 0 0 0 0 0 0
            0 0 0 0 4 4 0 0 0
            0 0 0 4 4 0 0 0 0
            0 0 4 4 0 0 0 4 0
            0 4 4 0 0 0 4 4 0
            0 4 0 0 0 4 4 0 0
            0 0 0 0 4 4 0 0 0
            0 0 0 4 4 0 0 0 0
            0 0 0 0 0 0 0 0 0"
    />
</geometry>
```

## 4. Realisztikus hatáskeresztmetszetek

A hatáskeresztmetszet beolvasó modult a [4] projektből vettük át. A kód az ENDF-B-VII.1 [7] hatáskeresztmetszet adatokat használja fel, a könyvtár elérési útját a beállításokat tartalmazó fájlban az *xs\_dir* után adhatjuk meg. Az alábbi táblázatok tartalmazzák a ENDF-ből használt MT számokat a reakciók megnevezésével.

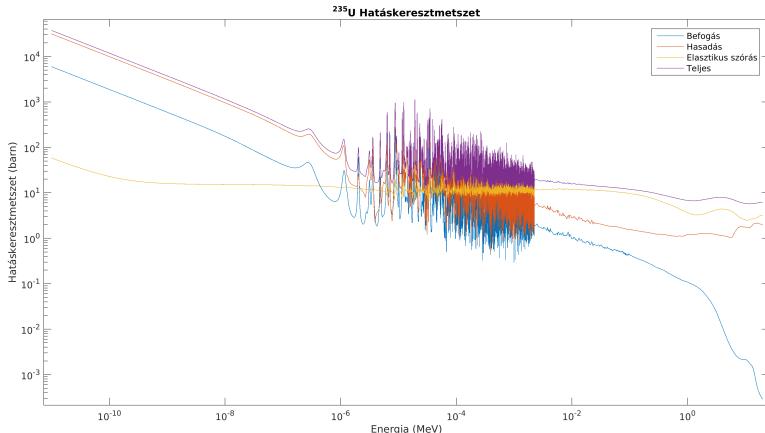
1. táblázat: MT numbers

MT	Description
2	Elastic scattering cross section.
5	Sum of all reactions not given explicitly in another MT number.
11	Production of two neutrons and a deuteron, plus a residual.
16	Production of two neutrons, plus a residual.
17	Production of three neutrons, plus a residual.
18	Total fission.
19	First-chance fission.
20	Second-chance fission.
21	Third-chance fission.
22	Production of a neutron and alpha particle, plus a residual.
23	Production of a neutron and three alpha particles, plus a residual.
24	Production of two neutrons and an alpha particle, plus a residual.
25	Production of three neutrons and an alpha particle, plus a residual.
28	Production of a neutron and a proton, plus a residual.
29	Production of a neutron and two alpha particles, plus a residual.
30	Production of two neutrons and two alpha particles, plus a residual.
32	Production of a neutron and a deuteron, plus a residual.
33	Production of a neutron and a triton, plus a residual.
34	Production of a neutron and a $^3\text{He}$ particle, plus a residual.
35	Production of a neutron, a deuteron, and two alpha particles, plus a residual.
36	Production of a neutron, a triton, and two alpha particles, plus a residual.
37	Production of four neutrons, plus a residual.
38	Fourth-chance fission.
41	Production of two neutrons and a proton, plus a residual.
42	Production of three neutrons and a proton, plus a residual.
44	Production of a neutron and two protons, plus a residual.
45	Production of a neutron, a proton, and an alpha particle, plus a residual.
51	Production of a neutron, nucleus in the first excited state.
52	Production of a neutron, nucleus in the second excited state.
...	
90	Production of a neutron, nucleus in the 40th excited state.
91	Production of a neutron in the continuum.

## 4.1. Izotópok

A program jelenlegi verziója már képes használni az izotópokhoz tartozó totális és abszorpciós hatáskeresztmetszeteket, valamint az egyes reakciókhöz tartozó hatáskeresztmetszetek, energieloszlásokat, szögeloszlásokat,  $\nu$ -

eloszlásokat és a későneutron csoportok adatait is. A 296.3 K hőmérséklethez tartozó  $^{235}U$  hatáskeresztmetszetei láthatóak a 8. ábrán.



8. ábra. A program által használt hatáskeresztmetszetek  $^{235}U$  esetén

Az izotóp neve után a tömegszám helyett a *-Nat* kifejezést használva a program a természetes izotóp összetételt fogja használni. Ha az izotóp után egy pontot teszünk, és utána az adatbázis számát, akkor külön arra az izotópra az anyagban használható más kiértékelés is. Ha csak a természetes izotópra érhető el adat, akkor a kötőjel után nullákat kell megadni, például a szén esetén *C-00*.

## 4.2. Anyagok

Az anyagokat izotópokból alkothatjuk meg, megadva az egyes izotópek részarányát és az anyag sűrűségét. A részarányok megadására két lehetőségünk van, megadhatjuk az atomi részarányukat az *atomic* és a tömegarányukat a *weight* opcionálval. A sűrűség értéke lehet  $\frac{g}{cm^3}$  a  $g/cm^3$  vagy atomi sűrűség az *atom/b-cm* esetén.

Az anyagot alkotó izotópok hatáskeresztmetszeiből egy közös energiarácsra kiszámoljuk az anyagra vonatkozó teljes hatáskeresztmetszeteket és még egy ugyanakkora rácson tároljuk energiánként a majoráns hatáskeresztmetszetet a Woodcock-módszerhez.

## 4.3. Anyagi leíró

Az alábbiakban egy egyszerű példa látható az anyagi leíróra, melyben két anyagot definiáltunk az egyikben  $^{235}U$  és  $^{238}U$  található a másik víz. Az

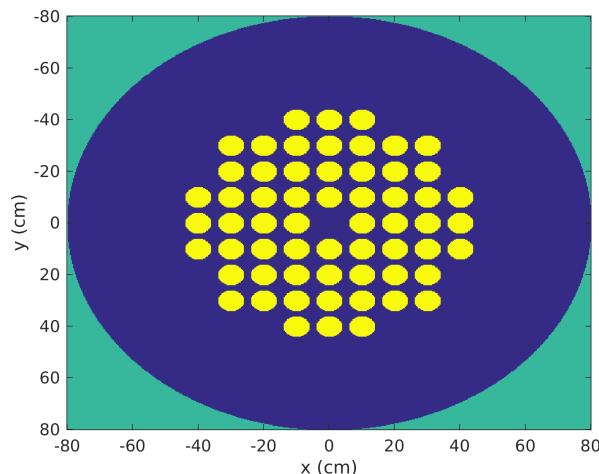
anyagok indexének számozása tetszőleges, akár szöveges is lehet.

Listing 4. materials.xml

```
<materials>
    <material id="1" density="19" units="g/cm3" fraction="atomic"
dataset="80c">
        <isotope name="U-235" fraction="0.9736"/>
        <isotope name="Fe-Nat" fraction="0.0275"/>
    </material>
    <material id="2" density="1.0" units="atom/b-cm" fraction="weight"
dataset="80c">
        <isotope name="H-1" fraction="2.0"/>
        <isotope name="O-16.50c" fraction="1.0"/>
        <isotope name="C-00" fraction="0.5"/>
    </material>
</materials>
```

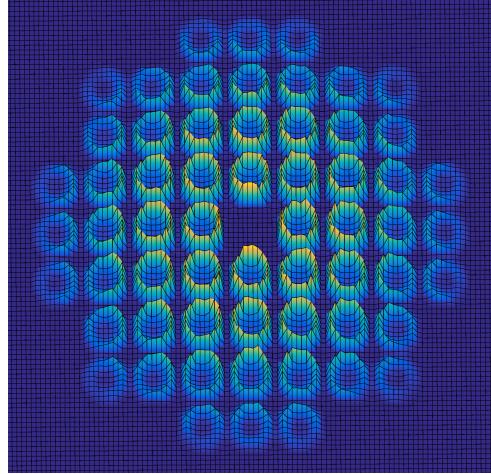
## 5. Geometriai és anyagi leírók tesztelése

Az előző fejezetekben bemutatottak tesztelésére egy víz hengerbe helyeztünk el dúsított uránt tartalmazó rudakat, ennek elrendezése látható a a 9. ábrán.



9. ábra. Anyagtérkép

Minden neutront az origóból indítottunk, a 10. ábrán látható 0.001 s elteltével a kialakult teljesítménysűrűség középső szelete.



10. ábra. A teljesítménysűrűség 0.001s után

## 6. Fizikai modellek

### 6.1. Szabad úthossz sorsolás

Homogén anyageloszlás esetén a részecske két ütközés között megtett távolságának ( $\ell$ ) a sűrűségsúrűsége:

$$\rho(\ell)d\ell = \Sigma_t e^{-\Sigma_t \ell} d\ell \quad (2)$$

ahol  $\Sigma_t$  az anyag teljes makroszkópikus hatáskeresztmetszete. A távolság mintavételezéséhez meg kell határozni az eloszlásfüggvényt:

$$\int_0^\ell \rho(\ell')d\ell' = \int_0^\ell \Sigma_t e^{-\Sigma_t \ell'} d\ell' = 1 - e^{-\Sigma_t \ell}. \quad (3)$$

Ezt tegyük egyenlővé egy  $[0, 1]$  intervallumon egyenletesen sorsolt  $\xi$  véletlen számmal, majd fejezzük ki az  $\ell$  ütközési távolságot:

$$\ell = -\frac{\ln(1 - \xi)}{\Sigma_t}. \quad (4)$$

A kapott  $1 - \xi$  szintén egyenletes eloszlás a  $[0, 1]$  intervallumon, így a távolságot egyszerűbb alakban is mintavételezhetjük:

$$\ell = -\frac{\ln \xi}{\Sigma_t} \quad (5)$$

Mivel egy reaktor inhomogén közeg, ezért nem használhatjuk a homogén esetre felírt mintavételezést, helyette a Woodcock-módszert alkalmazzuk. Előző lépésként a majoráns hatáskeresztmetszetet kell meghatároznunk, ehhez a

térfogatban jelen lévő anyagok totális hatáskeresztmetszetei közül energiánként kiválasztjuk a legnagyobbat.

A transzport során a (5) egyenlet alapján mintavételezzük a távolságot azzal a módosítással, hogy  $\Sigma_t$  helyett a majoráns hatáskeresztmetszetet használjuk. A mintavételezett távolsággal a megfelelő irányba eltoljuk a részecs-két és elvégezzük a következő felbontást:

$$\Sigma_t^{maj}(E) = \Sigma_t(\mathbf{r}, E) + \Sigma_v(\mathbf{r}, E) \quad (6)$$

ahol  $\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$  az  $\mathbf{r}$  pontban a teljes hatáskeresztmetszet,  $\Sigma_v(\mathbf{r}, E)$  pedig a virtuális hatáskeresztmetszet. Egy véletlen szám segítségével választunk, hogy virtuális, vagy valódi ütközés történik, ha virtuális, akkor újabb szabadúthosszat sorsolunk, ha valódi, akkor reakciót sorsolunk az adott pontbeli hatáskeresztmetszetek és a részecske energiájának függvényében.

## 6.2. Izotóp és reakció sorsolása

Ha az anyagot, amelyben a reakció történik,  $N$  különböző izotóp alkotja, akkor a teljes hatáskeresztmetszetek alapján sorsolunk kell egy izotópot. Legyen  $\xi$  a  $[0, 1]$  intervallumon egyenletesen mintavételezett véletlenszám, ekkor az  $n$ . izotópot választjuk, ha igaz, hogy

$$\sum_{i=1}^{n-1} \Sigma_{t,i}(E) < \xi \sum_{i=1}^N \Sigma_{t,i}(E) < \sum_{i=1}^n \Sigma_{t,i}(E) \quad (7)$$

$\Sigma_{t,i}(E)$  a teljes makroszkopikus hatáskeresztmetszete az  $i$ . izotópnak az  $E$  energián.

Az izotóp kiválasztása után implicit befogással modellezünk az elnyelési reakciókat, majd ha az izotópnak  $R$  különböző reakciója van, akkor a hatáskeresztmetszetek arányában sorsolunk egyet. A fentiekhez hasonlóan  $xi$  véletlenszámot újrasorsolva az  $r$ . reakciót választjuk, ha igaz, hogy

$$\sum_{i=1}^{r-1} \sigma_i(E) < \xi \sum_{i=1}^R \sigma_i(E) < \sum_{i=1}^r \sigma_i(E) \quad (8)$$

$\sigma_i(E)$  az  $i$ . reakció hatáskeresztmetszete az  $E$  energián.

## 6.3. ( $n, \gamma$ ) és egyéb elnyelési reakciók

Minden neutron elnyeléssel járó reakciót, amiben nem keletkezik másodlagos neutron, implicit befogással kezelünk ( $MT=101$ ). Ezekben a reakciókban meg kellene semmisítenünk a követett neutront, de ez a GPU-n a szálak

divergálásához vezetne, és a hatékonyság jelentősen csökkenne. Az implicit befogás során a neutron megölése helyett minden ütközésben annak súlyát csökkentjük a túlélés valószínűségével:

$$w' = w \left( 1 - \frac{\sigma_c(E)}{\sigma_t(E)} \right) \quad (9)$$

ahol  $w$  a neutron eredeti,  $w'$  a implicit befogás utáni súlya,  $\sigma_c$  a befogási hatáskeresztmetszet,  $\sigma_c(E) = \sigma_a(E) - \sigma_f(E)$ .

#### 6.4. Rugalmas szórás

Tömegközépponti rendszerben rugalmas szórás esetén a neutron nem veszít energiájából, azonban laboratóriumi koordináta-rendszerben csökken az energiája. Bizonyos energia szint felett ( $400kT$  és ha nem  ${}^1H$  a mag) a szórásban a target magot nyugalomban lévőnek tekintjük, ez alatt azonban figyelembe kell vennünk annak hőmozgását. A target mag sebességének mintavételezését később a 6.9 fejezetben mutatjuk be, most legyen a mintavételezett sebesség  $\mathbf{v}_t$ . Egy neutron és egy atom ütközése esetén a tömegközéppont sebessége a következőképp számolható:

$$\mathbf{v}_{tkp} = \frac{\mathbf{v}_n + A\mathbf{v}_t}{A + 1} \quad (10)$$

ahol  $\mathbf{v}_n$  a neutron sebessége és  $A$  a target mag tömege neutron tömegegy-ségen kifejezve. Ezután meghatározhatjuk a neutron sebességét ebben a rendszerben:

$$\mathbf{V}_n = \mathbf{v}_n - \mathbf{v}_{tkp} \quad (11)$$

ahol  $\mathbf{V}_n$  jelöli a neutron sebességét tömegközépponti rendszerben, ebből számolhatjuk a neutron irányát:

$$\boldsymbol{\Omega}_n = \frac{\mathbf{V}_n}{||\mathbf{V}_n||}. \quad (12)$$

Alacsony energián tömegközépponti rendszerben a rugalmas szórás izotróp, de nagyobb energiákon lehetnek olyan hatások, amelyek anizotróp szórást eredményeznek. Így általában a szórási szög koszinuszát mintavételezni kell, amire a későbbiekben  $\mu$ -ként hivatkozunk. Rugalmas szórás esetén a szög eloszlása minden tömegközépponti rendszerben van megadva mintavételezését a 6.6 fejezetben mutatjuk be. Miután a szórási szög koszinuszát mintavételeztük, meg kell határoznunk a neutron új irányát  $\boldsymbol{\Omega}'_n$  tömegközépponti rendszerben, ezt mutatjuk be a 6.8 fejezetben. Az új irányvektort megszorozva

a neutron sebességével megkapjuk az új sebességvektort a tömegközépponti rendszerben:

$$\mathbf{V}'_n = ||\mathbf{V}_n||\Omega'_n. \quad (13)$$

Végül a sebességet át kell transzformálni laboratóriumi koordinátarendszerbe:

$$\mathbf{v}'_n = \mathbf{V}'_n + \mathbf{v}_{tkp} \quad (14)$$

A programban a neutron sebességvektora helyett az irányvektort és az energiát tároljuk, melyek laboratóriumi koordináta-rendszerben értendők.

## 6.5. Rugalmatlan szórás

Minden egyéb reakciót rugalmatlan szórásnak tekintünk, melyekhez a szórási szög koszinuszát kell mintavételeznünk a 6.6. fejezetben leírtak szerint, majd a 6.7. fejezetben leírt algoritmus alapján mintavételezzük a reakció utáni energiát. Ha az energia és a szórási szög a tömegközépponti rendszerben volt megadva, akkor azt át kell transzformálnunk laboratóriumi koordinátarendszerbe a 6.8 alapján. Végül a szórási szög koszinuszából határozzuk meg a neutron új irányvektorát. A rugalmatlan szórás a target magot gerjesztett állapotban hagyja, nem követi a keletkező fotonok útját.

Mivel az (n,xn) reakciókat és a hasadást is rugalmatlan szórásnak tekintjük, nem különböztetjük meg őket, ezért minden reakcióhoz tároljuk a  $\nu$  értékeit, értelemszerűen, ha nem neutrontermelő a reakció, akkor  $\nu = 1$ . Bizonyos esetekben a keletkezett neutronok száma függ a reakcióba lépő neutron energiájától (ami előfordulhat  $MT=5$  esetén). A reakció végén a részecske súlyát szorozzuk a keletkező neutronok számával. A hasadások miatt a teljes  $\nu_t$  mellett a prompt  $\nu_p$  értékeit is tároljuk. (Ha nincs késő neutron, akkor  $\nu_t = \nu_p$  )

Hasadás esetén először szükség van a prompt és a késő neutronok számára, hogy el tudjuk dönteni, hogy milyen neutron fog keletkezni. Ez azért fontos, mert a késneutronoknak spektruma jelentősen eltér a prompt neutronokétől. A kibocsátott neutronok teljes száma  $\nu_t$  a bejövő neutron energiájának függvénye, mely kétféle reprezentációban létezik. Az első esetben  $N$ -ed rendű polinomként közelítjük  $c_0, c_1, \dots, c_N$  együtthatókkal, ekkor a bejövő energia  $E$  függvényében  $\nu_t$ -t a következőképp számolhatjuk:

$$\nu_t(E) = \sum_{i=0}^N c_i E^i. \quad (15)$$

A másik lehetséges formátum a táblázatos megadás a megadott interpolációs törvénytellyel. Az egy hasadásban keletkező prompt neutronok száma  $\nu_p$  a fentiekhez hasonlóan kétféleképpen lehet megadva, míg a későneutronok száma

$\nu_d$  csak táblázatos formában lehet adott. Praktikusan csak  $\nu_t$  és  $\nu_p$ -re van szükségünk, ezekből már meghatározhatjuk a későneutron hányadot:

$$\beta = 1 - \frac{\nu_p(E)}{\nu_t(E)}. \quad (16)$$

Ezután a neutron súlyát még meg kell szorozzuk a keletkezett neutronok számával.

$$w' = w \cdot \nu_t(E) \quad (17)$$

ahol  $w'$  a neutron hasadás utáni súlya. Amennyiben későneutron keletkezett, szükséges még egy lépés, mellyel mintavételezünk egy prekurzor csoportot, melyeknek saját energiaeloszlása van.

## 6.6. Másodlagos részecskék szögeloszlása

Minden olyan reakcióban, amiben keletkezik másodlagos neutron, szükség van a reakció utáni szög és energia eloszlások mintavételezésére. Néhány esetben a szög és az energia eloszlások külön-külön vannak specifikálva, más esetben pedig egy korrelált szög-energia eloszlás van megadva. A következő fejezetekben bemutatjuk azokat a módszereket, ahogy ezekből az eloszlásokból mintát kell venni.

A rugalmas szórás esetén csak a szögeloszlás mintavételezésére van szükség, mivel a kijövő neutron energiája analitikusan számolható. Vannak egyéb reakciók, ahol külön adott a szögeloszlás. Ezekben az esetekben a szögeloszlás megadása háromféleképpen lehetséges:

- izotróp szögeloszlás,
- egyenlő valószínűségű osztásközök 32 osztással,
- táblázatos eloszlás.

A második eset számunkra felesleges bonyolítás, ezért ezt átalakítjuk táblázatos formára, kiszámolva a sűrűség- és az eloszlásfüggvényeket. Ezzel veszítünk egy kis memóriát, de egyszerűsítjük az algoritmust.

### 6.6.1. Egyenletes eloszlású szög sorsolása

Az első esetben nincs szükség eltárolt táblázatra a szög koszinusza egyszerűen számolható:

$$\mu = 2\xi - 1 \quad (18)$$

ahol  $\mu$  a szórási szög koszinusza és  $\xi$  a  $[0, 1]$  intervallumon egyenletesen mintavételezett véletlen szám.

### 6.6.2. Táblázatos szögeloszlás

A táblázatos megadás arra szolgál, hogy pontosabb adatsorral dolgozhasunk. Ebben az esetben rendelkezésünkre áll egy táblázatos eloszlás, mely tartalmazza a szórási szög koszinuszát valamint a hozzájuk tartozó sűrűségfüggvény és eloszlásfüggvény értékeit.

Minden bejövő  $E_i$  energiára legyen  $p_{i,j}$  a  $j$ . érték a sűrűségfüggvényben és  $c_{i,j}$  a  $j$ . érték az eloszlásfüggvényben. Először is a bejövő energia rácsra meg kell keresnünk az interpolációs faktort:

$$f = \frac{E - E_i}{E_{i+1} - E_i} \quad (19)$$

ahol  $E$  a bejövő részecske energiája. Legyen  $\ell$  a kiválasztott táblázat, ahol  $\ell = i$  ha  $\xi_1 > f$  és  $\ell = i + 1$  máskülönben, ahol  $\xi_1$  egy véletlen szám. Használunk fel egy másik véletlen számot  $\xi_2$ , hogy mintavételezzük a szórási szög koszinuszának  $j$ . bin-jét, felhasználva az eloszlásfüggvényt:

$$c_{\ell,j} < \xi_2 < c_{\ell,j+1} \quad (20)$$

A végső szórási koszinusz attól függ, hogy milyen interpolációs séma van megadva az eloszláshoz, hisztogram vagy lineáris-lineáris. Általános esetben az eloszlásfüggvényt a következőképpen írhatjuk:

$$c(\mu) = \int_{-1}^{\mu} p(\mu') d\mu' \quad (21)$$

ahol  $c(\mu)$  az eloszlásfüggvény és  $p(\mu)$  a sűrűségfüggvény. Mivel tudjuk, hogy  $c(\mu_{\ell,j}) = c_{\ell,j}$ , ez azt jelenti, hogy  $\mu > \mu_{\ell,j}$ ,

$$c(\mu) = c_{\ell,j} + \int_{\mu_{\ell,j}}^{\mu} p(\mu') d\mu' \quad (22)$$

Hisztogram interpoláció esetén  $p(\mu') = p_{\ell,j}$   $\mu_{\ell,j} \leq \mu' < \mu_{\ell,j+1}$ . Így (22) integrálása után kapjuk:

$$c(\mu) = c_{\ell,j} + (\mu - \mu_{\ell,j}) p_{\ell,j} = \xi_2 \quad (23)$$

Megoldva a szórási szög koszinuszára, kapjuk a végső alakot a hisztogram interpolációhoz:

$$\mu = \mu_{\ell,j} + \frac{\xi_2 - c_{\ell,j}}{p_{\ell,j}}. \quad (24)$$

Lineáris-lineáris interpolációhoz a  $p(\mu')$  függvényt  $\mu'$ -ben elsőrendű polinomként közelítjük. Ha interpolálunk a sűrűségfüggvény egymást követő értékei között:

$$p(\mu') - p_{\ell,j} = \frac{p_{\ell,j+1} - p_{\ell,j}}{\mu_{\ell,j+1} - \mu_{\ell,j}} (\mu' - \mu_{\ell,j}) \quad (25)$$

Kifejezve  $p(\mu')$ -t a (25) egyenletből és behelyettesítve a (22) egyenletbe, kapjuk:

$$c(\mu) = c_{\ell,j} + \int_{\mu_{\ell,j}}^{\mu} \left[ \frac{p_{\ell,j+1} - p_{\ell,j}}{\mu_{\ell,j+1} - \mu_{\ell,j}} (\mu' - \mu_{\ell,j}) + p_{\ell,j} \right] d\mu'. \quad (26)$$

Használjuk a következő helyettesítést:

$$\eta = \frac{p_{\ell,j+1} - p_{\ell,j}}{\mu_{\ell,j+1} - \mu_{\ell,j}} (\mu' - \mu_{\ell,j}) + p_{\ell,j}. \quad (27)$$

Ezzel a (26) egyenlet a következőképp alakul:

$$c(\mu) = c_{\ell,j} + \frac{1}{m} \int_{p_{\ell,j}}^{m(\mu - \mu_{\ell,j}) + p_{\ell,j}} \eta d\eta \quad (28)$$

ahol  $m$  a következőt jelöli:

$$m = \frac{p_{\ell,j+1} - p_{\ell,j}}{\mu_{\ell,j+1} - \mu_{\ell,j}}. \quad (29)$$

A (28) egyenletben elvégezve az integrálást:

$$c(\mu) = c_{\ell,j} + \frac{1}{2m} \left( [m(\mu - \mu_{\ell,j}) + p_{\ell,j}]^2 - p_{\ell,j}^2 \right) = \xi_2 \quad (30)$$

Megoldva  $\mu$ -re, kapjuk a végső formát lineáris-lineáris interpolációt használva:

$$\mu = \mu_{\ell,j} + \frac{1}{m} \left( \sqrt{p_{\ell,j}^2 + 2m(\xi_2 - c_{\ell,j})} - p_{\ell,j} \right) \quad (31)$$

### 6.6.3. ACE Law 44 - Kalbach-Mann korrelált szórás

Az előzőektől eltérően ebben az esetben szükség előbb az energiát kell mintavételeznünk a 6.7.6. fejezet alapján, melynek  $j$  indexét kell felhasználnunk az eltárolt faktorok meghatározására. minden táblázatos  $E_i$  energiához tartozik egy tömb a **precompound factors**  $R_{i,j}$  és a szögeloszlás meredekségei  $A_{i,j}$ , ahol  $j$  a kimeneti energiához tartozó index. Hisztogram interpoláció esetén a paraméterek:

$$R = R_{\ell,j} \quad (32)$$

$$A = A_{\ell,j}. \quad (33)$$

Lineáris-lineáris interpoáció esetén:

$$R = R_{\ell,j} + \frac{\hat{E} - E_{\ell,j}}{E_{\ell,j+1} - E_{\ell,j}} (R_{\ell,j+1} - R_{\ell,j}) \quad (34)$$

$$A = A_{\ell,j} + \frac{\hat{E} - E_{\ell,j}}{E_{\ell,j+1} - E_{\ell,j}} (A_{\ell,j+1} - A_{\ell,j}) \quad (35)$$

ahol  $\hat{E}$  a (47) egyenletben definiált. A paraméterekkel a szórási szög koszinuszának sűrűségfüggvénye:

$$p(\mu)d\mu = \frac{A}{2 \sinh(A)} [\cosh(A\mu) + R \sinh(A\mu)] d\mu. \quad (36)$$

Ennek a sűrűségfüggvénynek a mintavételezéséhez a C39 és a C40 mintavételezési szabályokat kell használnunk. Először is kell két egyenletesen mintavételezett véletlen szám a  $[0, 1)$  intervallumon  $\xi_3, \xi_4$ . Ha  $\xi_3 > R$  akkor a kimenő szög:

$$\mu = \frac{1}{A} \ln \left( T + \sqrt{T^2 + 1} \right) \quad (37)$$

ahol  $T = (2\xi_4 - 1) \sinh(A)$ . Ha  $\xi_3 \leq R$ , akkor a kimenő szög:

$$\mu = \frac{1}{A} \ln \left( \xi_4 e^A + (1 - \xi_4) e^{-A} \right). \quad (38)$$

[9]

#### 6.6.4. Irányvektor meghatározása

A szórási szög koszinusza csak azt adja meg, hogy mekkora a szög a neutron új és a régi iránya között. Legyen a részecske ütközés előtti iránya  $\boldsymbol{\Omega} = (u, v, w)$  és ütközés utáni  $\boldsymbol{\Omega}' = (u', v', w')$ . Először is  $[0, 2\pi)$  között egyenletesen kell mintavételeznünk egy  $\phi$  azimutszöget, ezután meghatározhatjuk az új irány komponenseit:

$$u' = \mu u + \frac{\sqrt{1 - \mu^2}(uw \cos \phi - v \sin \phi)}{\sqrt{1 - w^2}} \quad (39)$$

$$v' = \mu v + \frac{\sqrt{1 - \mu^2}(vw \cos \phi + u \sin \phi)}{\sqrt{1 - w^2}} \quad (40)$$

$$w' = \mu w - \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - w^2} \cos \phi. \quad (41)$$

## 6.7. Másodlagos részecskék energieloszlása

A rugalmas szórásban minden egyéb reakcióban a kimeneti energiát táblázatos vagy paraméteres adatokból határozzák meg. Az ENDF-6 formátum többféle formátumot ad meg az energia reprezentálására. ENDF fájl 5 tartalmazza az korrelálatlan energia eloszlást, ENDF fájl 6 pedig a korrelált energia-szög eloszlásokat. A program az ACE-formátumú (*A Compact ENDF*) hatáskeresztmetszeteket olvassa be. Ebben a fejezetben bemutatjuk, hogyan határozzák meg a kimenő energiát az ACE törvények alapján. Az ACE formátum egyik finomsága az a tény, hogy egy reakciónak is lehet több energieloszlása. Ez elsősorban olyan reakcióknál hasznos, ahol több neutron keletkezik például az  $(n, 2n)$  vagy  $(n, 3n)$  reakciók esetén. Ezeknél a reakcióknál minden kibocsátott neutron után a mag más gerjesztett állapotba kerül, és így általában a neutron másik energieloszlásból származik.

Ha a több energieloszlás is adott, akkor mindegyikhez tartozik egy energia szerinti valószínűség is, ezt felhasználva egy reakció helyett  $n$ -et hozunk létre, minden energieloszlásnak megfelelően. Ezáltal minden reakcióhoz több hatáskeresztmetszetet köthetünk össze, amelyekkel meghatározhatjuk az eredeti hatáskeresztmetszetet.

Miután az energieloszlást kiválasztottuk, az energia meghatározása attól függ, hogy az adathoz milyen ACE törvény van meghatározva.

- ACE Law 3: Inelastic scatter from nuclear levels
- ACE Law 4: Tabular distribution
- ACE Law 7: Simple Maxwell fission spectrum
- ACE Law 9: Evaporation spectrum
- ACE Law 11: Energy dependent Watt spectrum
- ACE Law 44: correlated energy-angle scatter
- ACE Law 61: correlated energy-angle scatter
- ACE Law 66: N-body phase space distribution

### 6.7.1. ACE Law 3 - Inelastic Level Scattering

Rugalmatlan **Level** szórás esetén a neutron  $E'$  kimeneti energiája számolható a reakcióhoz tartozó  $Q$ -érték és a bejövő neutron energiából:

$$E' = \left( \frac{A}{A+1} \right)^2 \left( E - \frac{A+1}{A} Q \right) \quad (42)$$

ahol  $A$  a targetmag tömege neutron tömegegységben mérve [9].

### 6.7.2. ACE Law 4 - Folytonos táblázatos eloszlás

A kimeneti energia eloszlás minden bemenő energiára egy sűrűségfüggvényként van megadva. minden bejövő  $E_i$  energiához legyen  $p_{i,j}$  a  $j$ . érték a sűrűségfüggvényben,  $c_{i,j}$  a  $j$ . érték az eloszlásfüggvényben és  $E_{i,j}$  a  $j$ . kimenő energia.

Először is a neutron aktuális energiából meg kell határoznunk, hogy melyik energia osztásba esik, vagyis meg kell találnunk  $i$ -t, amire teljesül, hogy  $E_i < E < E_{i+1}$ , és ki kell számolnunk  $f$  interpolációs faktort (19) alapján. Ha csak egyszerűen interpolálnánk a szomszédos értékek között, a kimeneti energia kívül eshet a reakcióhoz megadott energia tartományon. Ennek elkerülése érdekében **scaled interpolation-t** [11] használunk.

Először interpolálunk az  $E_i$  és  $E_{i+1}$ -hez tartozó energiaeloszlások minimumai és maximumai között:

$$E_{min} = E_{i,1} + f(E_{i+1,1} - E_{i,1}) \quad (43)$$

$$E_{max} = E_{i,M} + f(E_{i+1,M} - E_{i,M}) \quad (44)$$

ahol  $E_{min}$  és  $E_{max}$  a minimum és a maximum kimenő energiája a skálázott eloszlásnak,  $E_{i,j}$  az  $E_i$  bemeneti energiához tartozó  $j$ . kimeneti energia és  $M$  a kimeneti energia osztásközök száma. Ezután **statistical interpolation-t** végzünk, hogy válasszunk  $E_i$  és  $E_{i+1}$  között, legyen  $\ell$  a választott index, ahol  $\ell = i$  ha  $\xi_1 > f$  és  $\ell = i + 1$  egyébként, és  $\xi_1$  egyenletes eloszlású véletlen szám.

Ezt követően mintavételezünk egy  $j$  indexet az eloszlásfüggvényt használva:

$$c_{\ell,j} < \xi_2 < c_{\ell,j+1} \quad (45)$$

ahol  $\xi_2$  egyenletesen mintavételezett véletlen szám a  $[0, 1]$  intervallumon. Ezután interpolálnunk kell az egymást követő értékek között a kimenő energia eloszlásában. Hisztogram interpolációt használva az  $\ell$ . eloszláson:

$$\hat{E} = E_{\ell,j} + \frac{\xi_2 - c_{\ell,j}}{p_{\ell,j}}. \quad (46)$$

Lineáris-lineáris interpolációt használva az  $\ell$ . eloszláson:

$$\hat{E} = E_{\ell,j} + \frac{E_{\ell,j+1} - E_{\ell,j}}{p_{\ell,j+1} - p_{\ell,j}} \left( \sqrt{p_{\ell,j}^2 + 2 \frac{p_{\ell,j+1} - p_{\ell,j}}{E_{\ell,j+1} - E_{\ell,j}} (\xi_2 - c_{\ell,j})} - p_{\ell,j} \right). \quad (47)$$

Mivel ez a kimenő energia megsértheti a reakció kinematikáját, ezért be kell skáláznunk a minimális és maximális energiával:

$$E' = E_{min} + \frac{\hat{E} - E_{\ell,1}}{E_{\ell,M} - E_{\ell,1}} (E_{max} - E_{min}) \quad (48)$$

ahol  $E_{min}$  és  $E_{max}$  ugyanúgy van definiálva, mint a (43) egyenletben [9].

### 6.7.3. ACE Law 7 - Maxwell-féle hasadási spektrum

Egyik reprezentációja a hasadás után keletkező neutron energiájára a Maxwell spektrum. A Maxwell spektrum sűrűségfüggvénye a következő formában írható fel:

$$p(E')dE' = cE'^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{E'}{T(E)}}dE' \quad (49)$$

ahol  $E$  az ütköző neutron energiája és  $T$  az úgynevezett nukleáris hőmérséklet, mely a bejövő neutron energiának függvénye, és az ACE formátum tartalmaz, interpolálni a megadott interpolációs törvény szerint kell. Miután a  $T$  hőmérsékletet meghatároztuk a C64 mintavételezési szabály alapján a kimenő energia:

$$E' = -T \left[ \log(\xi_1) + \log(\xi_2) \cos^2 \left( \frac{\pi \xi_3}{2} \right) \right] \quad (50)$$

ahol  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  egyenletesen mintavételezett véletlen számok  $[0, 1]$  intervallumon. Ezt az energiát csak akkor fogadjuk el, ha következő feltétel teljesül:

$$0 \leq E' \leq E - U \quad (51)$$

ahol  $U$  az úgynevezett *restriction energy* melyet az ACE táblázat tartalmaz. Ha az energiát nem fogadjuk el, újra mintavételeznünk kell a (50) egyenlet alapján [20].

### 6.7.4. ACE Law 9 - Párolgási spektrum

A párolgási spektrumot elsősorban olyan összetett atommagok esetén használjuk, ahol a másodlagos neutron elég energiával rendelkezik ahhoz, hogy "elpárologjon" az összetett magból. A párolgási spektrum sűrűségfüggvénye a következő formában írható:

$$p(E')dE' = cE'e^{-E'/T(E)}dE' \quad (52)$$

ahol  $E$  a neutron bejövő energiája és  $T$  a nukleáris hőmérséklet, ami a bejövő neutron energiának függvénye. Miután a hőmérsékletet meghatároztuk a LA-UR-14-27694-ben megadott algoritmussal a mintavételezett energia:

$$E' = -T \log((1 - g\xi_1)(1 - g\xi_2)) \quad (53)$$

ahol  $g = 1 - e^{-w}$ ,  $w = (E - U)/T$ ,  $U$  a *restriction energy*, és  $\xi_1, \xi_2$  a  $[0, 1]$  intervallumon egyenletesen mintavételezett véletlen számok. A kapott energiát csak akkor fogadjuk el, ha teljesül a (51) egyenletben felírt feltétel. Ennek az algoritmusnak a rejekciós hatékonysága sokkal nagyobb, mintha az alap C45 mintavételezési sémát használnánk [20].

### 6.7.5. ACE Law 11 - Energiafüggő Watt spektrum

A Watt hasadási spektrum sűrűségfüggvénye a következő alakban írható fel:

$$p(E')dE' = ce^{-E'/a(E)} \sinh \sqrt{b(E) E'} dE' \quad (54)$$

ahol  $a$  és  $b$  az eloszlás paraméterei és a bejövő neutron energiájának függvényében táblázatos formában adott, interpolálni a megadott törvény szerint kell. Miután a paramétereket meghatároztuk, mintavételezni a kimenő energia a következőképp mintavételezhető:

$$g = \sqrt{\left(1 + \frac{ab}{8}\right)^2 - 1} + 1 + \frac{ab}{8} \quad (55)$$

$$E' = ag \ln \xi_1 \quad (56)$$

ahol  $\xi_1, \xi_2$  a  $[0, 1]$  intervallumon egyenletesen mintavételezett véletlen szám. A kimenő energiát csak akkor fogadjuk el, ha az teljesíti a (51) egyenletben definiált feltételt és  $[(1 - g)(1 - \ln \xi_1) - \ln \xi_2]^2 \leq bE'$  [9].

### 6.7.6. ACE Law 44 - Kalbach-Mann korrelált szórás

Ez a törvény nagyon hasonló az ACE 4 törvényhez, annyi különbséggel, hogy a másodlagos neutron szöge és energiája összefüggő, és nem kell külön eloszlásból mintavételezni. A neutron energiáját ugyanúgy mintavételezzük, ahogy azt az ACE 4 törvényben leírtuk, majd a kimenő szöget kell kiszámítanunk a táblázatos Kalbach-Mann paraméterek alapján, melyet a 6.6.3. fejezetben írtunk le [9].

### 6.7.7. ACE Law 61 - Korrelált energia és szög eloszlás

Ebben az esetben ahelyett, hogy analitikus eloszlásból határoznánk meg a szórási szög koszinuszát, táblázatos eloszlásból határozzuk meg. minden bejövő  $i$  és kimenő  $j$  energiához tartozik egy táblázatos szög eloszlás. A neutron kimenő energiájának számolásához ugyanúgy kell eljárnunk, ahogy azt az ACE 4 törvény esetében leírtuk. Először is kiszámoljuk az  $f$  interpolációs faktort, és kiválasztjuk a bejövő energiához tartozó  $\ell$  indexet, majd a megadott táblázatos eloszlásfüggvény alapján mintavételezünk egy  $j$  kimenő energia indexet. Miután a kimenő energiát meghatároztuk a (48) egyenlet alapján, el kell döntenünk melyik szögeloszlást használjuk. Ha hisztogram interpolációt használunk a kimenő energia meghatározásánál, akkor az  $\ell$  bejövő és  $j$  kimenő energiához tartozó szögeloszlást kell használnunk. Ha lineáris-lineáris interpolációt használtunk, akkor azt használjuk, amelyikhez közelebb van a mintavételezett érték a kimenő energia eloszlásfüggvényénél [9].

### 6.7.8. ACE Law 66 - N-Body Phase Space Distribution

Azoknál a reakcióknál, amelyeknél több mint két részecske keletkezik hasonló tömeggel, a legjobb megoldás az **N-body phase distribution**. Az eloszlás sűrűségfüggvénye az  $i$ . részecskére tömegközépponti rendszerben:

$$p_i(E')dE' = C_n \sqrt{E'} (E_i^{max} - E')^{\frac{3n}{2}-4} dE' \quad (57)$$

ahol  $n$  a kimenő részecskék száma,  $C_n$  egy normalizációs konstans,  $E_i^{max}$  az  $i$ . részecske maximális energiája tömegközépponti rendszerben,  $E'$  a kimenő energia. A kimenő energia mintavételezéséhez az R28, C45 és C64 algoritmusokat használjuk. Először is ki kell számolnunk tömegközépponti rendszerben a maximális energiát:

$$E_i^{max} = \frac{A_p - 1}{A_p} \left( \frac{A}{A + 1} E + Q \right) \quad (58)$$

ahol  $A_p$  a teljes tömege a kimenő részecskéknek neutron tömegegységen mérve,  $A$  a target mag tömege neutron tömegegységen,  $Q$  a reakció energiája. Következő lépés, hogy az ACE 7 törvényben leírtak alapján mintavételezünk egy  $x$  értéket a Maxwell eloszlásból. Ezután még meg kell határoznunk  $y$  értékét, mely függ attól, hogy hány kimenő részecske fog keletkezni.  $n = 3$  esetén veszünk egy másik mintát a Maxwell eloszlásból a nukleáris hőmérőkkel.  $n = 4$  esetén a következő összefüggést kell használni:

$$y = -\ln(\xi_1 \xi_2 \xi_3) \quad (59)$$

ahol  $\xi_i$  egyenletesen mintavételezett véletlen számok a  $[0, 1]$  intervallumon.  $n = 5$  esetén pedig:

$$y = -\ln(\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4) - \ln(\xi_5) \cos^2 \left( \frac{\pi}{2} \xi_6 \right) \quad (60)$$

$x$  és  $y$  meghatározása után kiszámolhatjuk a kimenő energiát:

$$E' = \frac{x}{x + y} E_i^{max} \quad (61)$$

Az ENDF/B-VII.1 könyvtárban csak egy reakció használja ezt az eloszlást, az pedig a  $(n, 2n)$  reakció  ${}^2H$  esetén [20].

## 6.8. Koordináta-rendszer transzformációk

Miután a szórási szög koszinuszát  $\mu$ -t mintavételeztük a szögeloszlásból vagy a korrelált szög-energia eloszlásból, még hátravan a feladat, hogy a részecske

koordinátáját transzformáljuk. Ha a kimenő energia és szórási szög koszinusra tömegközépponti rendszerben adott, akkor először is át kell alakítanunk laboratóriumi koordináta-rendszerbe. Az összefüggés a kimenő energiára tömegközépponti és laboratóriumi rendszerben:

$$E' = E'_{cm} + \frac{E + 2\mu_{cm}(A + 1)\sqrt{EE'_{cm}}}{(A + 1)^2}. \quad (62)$$

ahol  $E'_{cm}$  a kimenő energia tömegközépponti rendszerbe,  $\mu_{cm}$  a szórási szög koszinusra tömegközépponti rendszerben,  $E'$  a kimenő energia laboratóriumi rendszerben és  $E$  a neutron bejövő energiája. Az összefüggés a szórási szög koszinuszára tömegközépponti és laboratóriumi rendszerben:

$$\mu = \mu_{cm}\sqrt{\frac{E'_{cm}}{E'}} + \frac{1}{A + 1}\sqrt{\frac{E}{E'}} \quad (63)$$

ahol  $\mu$  a szórási szög koszinusra laboratóriumi koordinátarendszerben.

## 6.9. A hőmozgás hatása a hatáskeresztmetszetre

Amikor egy neutron szóródik, a legtöbb esetben úgy közelíthetjük, hogy a targetmag nyugalomban van, azonban ez nem minden esetben tehető meg, mivel a valóságban az atommagok hőmozgást végeznek. Így a reakcióba lépő neutron sebessége eltér a maghoz viszonyított relatív sebességétől. A hőmozgás hatása a kölcsönhatás valószínűségére a következő alakban írható:

$$v_n \bar{\sigma}(v_n, T) = \int d\mathbf{v}_T v_r \sigma(v_r) M(\mathbf{v}_T) \quad (64)$$

ahol  $v_n$  a neutron sebességének nagysága  $\bar{\sigma}$  az effektív hatáskeresztmetszet,  $T$  a targetmag hőmérséklete,  $\mathbf{v}_T$  a targetmag sebessége  $v_r = \|\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_T\|$  a relatív sebesség nagysága,  $\sigma$  a hatáskeresztmetszet  $0K$ -en, és  $M(\mathbf{v}_T)$  a targetmag sebességének valószínűség eloszlása a  $T$  hőmérsékleten (Maxwell-eloszlás).

A módszer, amit a legtöbb Monte Carlo kód használ a targetmag sebességének mintavételezésére a rugalmas szórásban [12]-ben található meg. Először is írjuk fel a reakciógyakoriságot a targetmag sebességének függvényeként:

$$R(\mathbf{v}_T) = \|\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_T\| \sigma(\|\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_T\|) M(\mathbf{v}_T) \quad (65)$$

ahol  $R$  a reakciógyakoriság. Vegyük észre, hogy ez nem más, mint a (64) egyenlet jobb oldala. Ahogy a fentiekben leírtuk, a sűrűségfüggvényt szeretnénk megalkotni, ami tartalmazza a reakciógyakoriságot, és mintavételezhetjük belőle a targetmag sebességét. Integráljuk a (65) egyenletet:

$$p(\mathbf{v}_T) d\mathbf{v}_T = \frac{R(\mathbf{v}_T) d\mathbf{v}_T}{\int d\mathbf{v}_T R(\mathbf{v}_T)} \quad (66)$$

Az egyenlet nevezője, mely egy normalizációs faktor, legyen a továbbiakban  $C$ .

### 6.9.1. Konstans hatáskeresztmetszet modell

Gyakran feltesszük, hogy a minket érdeklő relatív sebesség tartományon  $\sigma(v_r)$  konstans. Ez egy jó közelítés az esetek nagy többségében mivel a rugalmas szórás hatáskeresztmetszete lassan változik a sebesség függvényében könnyű atommagokra nehéz magokra pedig ahol nagy eltérések fordulhatnak elő a rezonancia szórásoknál, a moderáló hatás meglehetősen kicsi. Ennek ellenére ez a közelítés nem minden esetben használható, alacsony energiájú rezonanciák jelentős felfelé-szórást okozhatnak (pl.:  $^{238}U$  hagyományos könnyűvizes reaktorokban). Ezzel a következő fejezetben foglalkozunk. A jelenlegi közelítésben írhatjuk, hogy  $\sigma(v_r) = \sigma_s$ , így (66) egyenlet a következőképp egyszerűsödik:

$$p(\mathbf{v}_T)d\mathbf{v}_T = \frac{\sigma_s}{C} \|\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_T\| M(\mathbf{v}_T)d\mathbf{v}_T \quad (67)$$

A Maxwell eloszlás a sebességre:

$$M(\mathbf{v}_T) = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{-m\|\mathbf{v}_T^2\|}{2kT} \right) \quad (68)$$

ahol  $m$  a targetmag tömege és  $k$  a Boltzmann állandó. Vegyük észre, hogy az exponensben található kifejezés csak a target sebességének nagyságától függ, és független az aktuális iránytól. A sebességvektor deriváltja:

$$d\mathbf{v}_T = v_T^2 dv_T d\mu d\phi \quad (69)$$

Definiáljuk a Maxwell eloszlást a sebességre:

$$M(v_T)dv_T = \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\phi dv_T v_T^2 M(\mathbf{v}_T) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \frac{m}{kT} \right)^{3/2} v_T^2 \exp \left( \frac{-mv_T}{2kT} \right) dv_T. \quad (70)$$

A képlet egyszerűsítéséhez definiáljuk a következő paramétert:

$$\beta = \sqrt{\frac{m}{2kT}}. \quad (71)$$

Helyettesítsük (71) kifejezést a (70) egyenletbe, így kapjuk:

$$M(v_T)dv_T = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \beta^3 v_T^2 \exp(-\beta^2 v_T^2) dv_T. \quad (72)$$

Váltsunk változót a (67) egyenletben, felhasználva a (70) egyenletet, így az új sűrűségfüggvény:

$$p(v_T, \mu) dv_T d\mu = \frac{4\sigma_s}{\sqrt{\pi} C'} ||\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_T|| \beta^3 v_T^2 \exp(-\beta^2 v_T^2) dv_T d\mu \quad (73)$$

A targetmag sebességének Maxwell eloszlása nem függ a neutron és a target mag sebességvektora által bezárt szögtől. Így csak a  $||\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_T||$  kifejezés ad korlátot a megengedett szögre. Utolsó feladatunk, hogy ezt a kifejezést átírjuk úgy, hogy a sebességvektor nagysága és a szög szerepeljen benne, ne pedig a vektorok. A koszinusztételel alapján írhatjuk, hogy

$$2v_n v_T \mu = v_n^2 + v_T^2 - v_r^2. \quad (74)$$

Ezt felhasználva írhatjuk, hogy

$$||\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_T|| = ||\mathbf{v}_r|| = v_r = \sqrt{v_n^2 + v_T^2 - 2v_n v_T \mu}. \quad (75)$$

Behelyettesítve (75) egyenletet (73) egyenletbe:

$$p(v_T, \mu) dv_T d\mu = \frac{4\sigma_s}{\sqrt{\pi} C'} \sqrt{v_n^2 + v_T^2 - 2v_n v_T \mu} \beta^3 v_T^2 \exp(-\beta^2 v_T^2) dv_T d\mu \quad (76)$$

Ez a kifejezés nem hasonlít egyik mintavételezhető függvényre sem, ezért osszuk fel két részre:

$$p(v_T, \mu) = f_1(v_T, \mu) f_2(v_T) \quad (77)$$

$$f_1(v_T, \mu) = \frac{4\sigma_s}{\sqrt{\pi} C'} \frac{\sqrt{v_n^2 + v_T^2 - 2v_n v_T \mu}}{v_n + v_T} \quad (78)$$

$$f_2(v_T) = (v_n + v_T) \beta^3 v_T^2 \exp(-\beta^2 v_T^2). \quad (79)$$

Általánosságban elmondható, hogy bármely sűrűségfüggvény, ami felírható  $p(x) = f_1(x) f_2(x)$  formában, ahol  $f_1(x)$  korlátos, mintavételezhetünk  $x'$ -t a következőből:

$$q(x) dx = \frac{f_2(x) dx}{\int f_2(x) dx} \quad (80)$$

és elfogadjuk, a következő valószínűsséggel:

$$p_{accept} = \frac{f_1(x')}{\max f_1(x)} \quad (81)$$

Az ok, amiért leosztottuk, és megsoroztuk a  $v_n + v_T$  kifejezéssel, hogy biztosítsuk az első rész korlátosságát. általában a  $||\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_T||$  kifejezés tetszőlegesen nagy értéket is felvehet, de ha leosztjuk a maximum értékével  $v_n + v_T$ -ve, ezzel biztosítjuk, hogy korlátos legyen. Már csak kell egy mintavételezási séma

a (80) egyenlethez. Ahhoz, hogy meghatározzuk a  $q(v_T)$ -t, integrálnunk kell  $f_2$ -t a (77) egyenletben, ezt elvégezve kapjuk:

$$\int_0^\infty dv_T (v_n + v_T) \beta^3 v_T^2 \exp(-\beta^2 v_T^2) = \frac{1}{4\beta} (\sqrt{\pi}\beta v_n + 2). \quad (82)$$

Így a következő sűrűségfüggvényt kell mintavételeznünk:

$$q(v_T)dv_T = \left( \frac{4\beta^2 v_n v_T^2}{\sqrt{\pi}\beta v_n + 2} + \frac{4\beta^4 v_T^3}{\sqrt{\pi}\beta v_n + 2} \right) \exp(-\beta^2 v_T^2). \quad (83)$$

Hajtsunk végre változócerét a következő definíciókkal:

$$x = \beta v_T y = \beta v_n. \quad (84)$$

Helyettesítsük be (84) (83) egyenletbe a  $dx = \beta dv_T$  kifejezéssel együtt és csináljunk egy trükkös átalakítást:

$$q(x)dx = \left[ \left( \frac{\sqrt{\pi}y}{\sqrt{\pi}y + 2} \right) \frac{4}{\sqrt{\pi}} x^2 e^{-x^2} + \left( \frac{2}{\sqrt{\pi}y + 2} \right) 2x^3 e^{-x^2} \right] dx. \quad (85)$$

Két tényt fontos megjegyeznünk. Először is a zárójeleken kívül lévő tagok megfelelően normalizált sűrűségfüggvények, melyeket közvetlenül mintavételezhetünk. Másodszor a zárójelben található kifejezések minden kisebbek mint egy. Így a mintavételezési séma  $q(x)$ -hez a következő: vegyük egy véletlen számot a  $\xi_1$  a  $[0, 1]$  intervallumon, és ha

$$\xi_1 < \frac{2}{\sqrt{\pi}y + 2} \quad (86)$$

Akkor mintavételezzük a  $2x^3 e^{-x^2}$  vaószínűség függvényt használva a C49 szabályt

$$x' = \sqrt{-\ln(\xi_1 \xi_2)} \quad (87)$$

, amiből a (84) egyenletből meghatározhatjuk a  $v_T$  target mag sebességét. Máskülönben mintavételezzük a  $\frac{4}{\sqrt{\pi}} x^2 e^{-x^2}$  függvényt a C61 szabályt használva.

$$x' = \sqrt{-\ln(\xi_1) - \ln(\xi_2) \cos^2\left(\frac{\pi}{2}\xi_3\right)} \quad (88)$$

Ha a target sebességét mintavételeztük, még el kell döntenünk a (81)-ban felírt valószínűség alapján, hogy elfogadjuk-e azt. A koszinusz egyenletesen mintavételezhetjük:  $\mu = 2\xi_2 - 1$ , ahol  $\xi_2$  egyenletesen mintavételezett véletlen

szám a  $[0, 1)$  intervallumon. A maximum értéke a  $f_1(v_T, \mu)$  függvénynek  $4\sigma_s/\sqrt{\pi}C'$ , sorsolunk egy újabb véletlen számot  $\xi_3$  és elfogadjuk a sebességet és a koszinuszt, ha

$$\xi_3 < \frac{\sqrt{v_n^2 + v_T^2 - 2v_n v_T \mu}}{v_n + v_T}. \quad (89)$$

ha nem fogadtuk el, akkor addig ismételjük a target sebességének és a koszinusznak a mintavételezését, amíg (89) feltétel nem teljesül [20].

### 6.9.2. Energiafüggő hatáskeresztmetszet modell

Ahogy korábban említettük, feltételeztük a rugalmas szórás hatáskeresztmetszete konstans a (65) egyenletben szigorúan véve nem korrekt, különösen amikor alacsony energiájú rezonanciák vannak nehéz atommagokra. Ahhoz, hogy helyesen vegyük figyelembe a szórási hatáskeresztmetszet energia függését, egy újabb rejekciós lépésre van szükségünk. A legelterjedtebb módszer, hogy mintavételezzük  $\mu$  és  $v_T$  értékeit konstans hatáskeresztmetszet közelítésben, majd végrehajtunk egy rejekciót a relatív sebességhez tartozó  $0K$ -es szórási hatáskeresztmetszetet osztva a megfelelő sebességtartomány maximálával:

$$p_{dbrc} = \frac{\sigma_s(v_r)}{\sigma_{s,max}} \quad (90)$$

ahol meg kell jegyeznünk, hogy a maximum a  $[v_n - 4/\beta, v_n + 4\beta]$  tartományra vonatkozik. Ez a módszer Doppler broadening rejection correction (DBRC) néven ismert.

## 6.10. $S(\alpha, \beta, T)$ táblázatok

A termikus energiájú neutronok ( $4eV$ -nál kisebbek) esetén a szórás kinematikájára hatással lehet ha az adott elem kémiai kötéssel rendelkezik, vagy kristályos rácsba rendeződik (pl.: könnyű- és nehézvíz, grafit, ZrH, BeO). Ilyen esetekben nincs általános analitikus formula a szórás kezelésére, speciális táblázatok adottak, melyek tartalmazzák a hatáskeresztmetszeteket, valamint a szög és energia szerinti eloszlásokat. minden  $S(\alpha, \beta, T)$  fájl a következőket tartalmazhatja:

- termikus rugalmatlan szórás hatáskeresztmetszete,
- termikus rugalmas szórás hatáskeresztmetszete,
- korrelált energia-szög eloszlás termikus rugalmatlan és rugalmas szórásához.

Ebben az esetben a *rugalmatlan* kifejezés a szórási rendszerre utal, rugalmatlan esetben a neutron energia nem változik, rugalmatlan esetben a rendszer gerjesztett állapotba kerül, ami kristályos anyagnál megfelelhet egy foton kibocsátásának, molekula esetén forgási vagy rezgési állapotnak. Általában minden eset inkohérent és koherens részekre osztható, a koherens rugalmatlan szórás vonatkozik a szilárd kristályos anyagban (grafit), az inkohérent pedig a szilárd hidrogénes anyagokban történő szóródásra (polietilén).

### 6.10.1. Rugalmatlan szórás

Inkohérent és koherens rugalmatlan szórás esetén a neutron energiája nem, csak a szöge változik, koherens rugalmatlan szórás esetén a szög függ attól, hogy a neutron melyik Bragg élen szóródott.

#### Inkohérent rugalmatlan szórás

Inkohérent rugalmatlan szórás esetén lineárisan interpolálható függvényként vannak megadva a hatáskeresztmetszet adatok a hozzá tartozó energiarácsra. A szórási szög koszinuszának eloszlása egyenlő valószínűségű diszkrét koszinuszok  $\mu_{i,j}$  sorozatával adott minden bejövő  $E_i$  energiára az energia rácsra. Először a kimenő szög  $j$  indexét mintavételezzük, majd ha a neutron energiája kielégíti a  $E_i < E < E_{i+1}$  feltételt, akkor a végső koszinusz a következőképp számolható:

$$\mu = \mu_{i,j} + f(\mu_{i+1,j} - \mu_{i,j}) \quad (91)$$

ahol  $f$  interpolációs faktor:

$$f = \frac{E - E_i}{E_{i+1} - E_i}. \quad (92)$$

#### Koherens rugalmatlan szórás

Ebben az esetben adottak  $D_k$  paraméterek, amiből a hatáskeresztmetszet a következőképpen számítható:

$$\sigma_{el}(E) = \frac{D_k}{E} \quad (93)$$

ha  $E_{Bk} \leq E < E_{Bk+1}$ , ha  $E < E_{B1}$  akkor 0,  $E_{Bk}$  a rácsparaméterekből származó Bragg energiák.

A szórási szög koszinuszának kiszámításához  $E$  bejövő energiára, ahol teljesül, hogy  $E_{Bk} \leq E \leq E_{Bk+1}$ ,

$$P_i = \frac{D_i}{D_k} \quad (94)$$

ahol  $i = 1, \dots, k$ , diszkrét kumulatív valószínűségi eloszlás, amit mintavételezve kapjuk az  $i$  indexet, ez reprezentálja az  $i$ . Bragg élen történő szóródást. A szórási szög koszinusza a következő összefüggésből számolható [9]:

$$\mu = 1 - \frac{2E_{Bi}}{E} \quad (95)$$

### 6.10.2. Rugalmatlan szórás

A hatáskeresztmetszetek lineárisan interpolálható függvényként vannak megadva a hozzá tartozó energiarácson.

Minden  $S(\alpha, \beta, T)$  táblázat tartalmaz egy korrelált energia-szög eloszlást termikus rugalmatlan szórásra. Ennek három különböző reprezentációja lehet az ACE termikus szórás adatban:

- egyenlő valószínűségű diszkrét energiák,
- nem egyenletes, de diszkrét energiák,
- folytonos energiák.

#### Egyenlő valószínűségű diszkrét energiák

Az ACE adatban az energia diszkrét és egyenlő valószínűségű adatokként szerepel. Először is az interpolációs faktort határozzuk meg a (92) egyenlet alapján, a kimenő energia binjét egyenletesen mintavételezzük, majd interpolálunk a megfelelő bejövő energia szomszédok között:

$$E = E_{i,j} + f(E_{i+1,j} - E_{i,j}) \quad (96)$$

ahol  $E_{i,j}$  az  $i$ -edik bejöv energiához tartozó  $j$ -edik kimenő energia. minden bejövő és kimenő energia kombinációra adott egy sorozat egyenlő valószínűségű szög koszinuszsa. A szög koszinuszának binjét egyenletesen mintavételezzük, majd interpolálunk a bejövő energia rácson a következőképpen:

$$\mu = \mu_{i,j,k} + f(\mu_{i+1,j,k} - \mu_{i,j,k}) \quad (97)$$

ahol  $\mu_{i,j,k}$   $j$ -edik kimenő és  $i$ -edik bejöv energiához tartozó  $k$ -adik koszinusz érték.

#### Nem egyenletes, de diszkrét energiák

Az ACE adatokban az energia reprezentációja a következő: az első és az utolsó kimenő energia relatív valószínűsége 1, a második és az utolsó előtti 4 és minden más 10. Az energia és a szög meghatározásának menete a fent leírtakhoz hasonló, de a mintavételezendő eloszlás ennek megfelelően eltolódott.

## Folytonos energiák

A kimenő energiák táblázatos formában adott lineáris-lineáris módon mintavételezendő folytonos eloszlások. A kimenő energia mintavételezése nagyon hasonló a ACE 61 törvényhez, de a korrelált szög mintavételezése úgy történik, ahogy a fenti két reprezentációban bemutattuk. Először kiszámoljuk az  $f$  interpolációs faktort, és kiválasztjuk a bejövő energiához tartozó  $\ell$  indexet, majd a megadott táblázatos eloszlásfüggvény alapján mintavételezünk egy  $j$  kimenő energia indexet. Miután a (48) egyenlet alapján meghatároztuk a kimenő energiát, el kell döntenünk, hogy melyik szögeloszlás adatot használjuk. Mint a lineáris-lineáris interpolációban a 61 törvénynél, azt a szögeloszlást használjuk, amelyik közelebb van a mintavételezett értékhez a kimenő energiánál, a szöget a (97) egyenlet alapján mintavételezzük.

## 6.11. Feloldatlan rezonanciák

A feloldatlan rezonancia energiatartományában a rezonanciák olyan közel lehetnek egymáshoz, hogy nem lehetséges kísérleti úton feloldani őket. Annak érdekében, hogy ezen az energiatartományon is megfelelő pontosságot érjünk el, valószínűségi táblázatos módszert használunk [13]. A legtöbb termikus reaktor esetében nincs számottevő hatása, azonban néhány gyors reaktorra és olyan esetben, ahol jelentős a fluxus ezen a tartományon, szükséges a korrekció a megfelelő pontosság eléréséhez. minden valószínűségi táblázat egy izotópra a következő információkat tartalmazza a feloldatlan rezonanciák tartományán:

- Kumulatív valószínűségek hatáskeresztmetszet tartományokra
- Teljes hatáskeresztmetszet/korrektíós faktor
- Rugalmas szórás hatáskeresztmetszete/korrektíós faktor
- Hasadási hatáskeresztmetszet/korrektíós faktor
- $(n, \gamma)$  hatáskeresztmetszet/korrektíós faktor
- Neutron **heating number**/korrekciós faktor

Az adatoknak csak az integrált hatáskeresztmetszetekre van hatása és nincs szükség szög- és energia eloszlások módosítására. A hatáskeresztmetszetek korrekciójához a feloldatlan rezonanciák tartományán, először a bejövő energia  $i$  indexét kell meghatároznunk, hogy  $E_i < E < E_{i+1}$ . Ezután mintavételezzük a  $j$  indexet az  $i$  valószínűségi táblázatból, majd meghatározzuk a rugalmas szórás, hasadás és befogás hatáskeresztmetszetét a valószínűségi

táblázatokból interpolálva az  $i$ . és az  $i+1$ . adatsor között. Ha az interpoláció lineáris-lineáris, akkor a hatáskeresztmetszetek a következőképp számolhatóak:

$$\sigma = \sigma_{i,j} + f(\sigma_{i+1,j} - \sigma_{i,j}) \quad (98)$$

ahol  $\sigma_{i,j}$  az  $i$ . bejövő energiához tartozó  $j$ . hatáskeresztmetszet,  $f$  az interpolációs faktor, ahogy a (92) egyenletben definiáltuk. Ha logaritmikus-logaritmikus interpoláció van definiálva, akkor a hatáskeresztmetszet számolása:

$$\sigma = e^{\log \sigma_{i,j} + f \log \frac{\sigma_{i+1,j}}{\sigma_{i,j}}} \quad (99)$$

ahol az interpolációs faktor meghatározása:

$$f = \frac{\log \frac{E}{E_i}}{\log \frac{E_{i+1}}{E_i}}. \quad (100)$$

A valószínűségi táblázatban továbbá meg van jelölve, hogy ki kell-e számolni a rugalmatlan szórás hatáskeresztmetszetét, ha igen, akkor ez a hagyományos hatáskeresztmetszetből történik. Végül, ha a hatáskeresztmetszetek faktorokként vannak definiálva, akkor a sima hatáskeresztmetszetet szoroznunk kell a feloldatlan rezonanciák tartományán, hogy megkapjuk az aktuális hatáskeresztmetszetet. A teljes hatáskeresztmetszet a rugalmas-, hasadási-, befogási- és rugalmatlan hatáskeresztmetszetek összegeként kell számolnunk.

## 6.12. Késő neutronok

Egy hasadásnál  $\beta$  valószínűsséggel késő neutron keletkezik. Ekkor sorsolunk kell a későneutron csoportok közül, majd a csoporthoz tartozó  $\lambda$  paraméterrel prekurzor időt kell mintavételeznünk. A sűrűségfüggvény a következő alakban írható fel:

$$\rho(t) = \frac{1}{A} e^{-\lambda t} = \lambda e^{-\lambda t} \quad (101)$$

$$\int_0^{\inf} \rho(t) dt = 1 \Rightarrow A = \int_0^{\inf} e^{-\lambda t} dt = \left[ -\frac{1}{\lambda} \cdot e^{-\lambda t} \right]_0^{\inf} = \frac{1}{\lambda} \quad (102)$$

$$t_i = \left[ \int_0^T \rho(t) dt \right]^{-1} (r_i) = \left[ -e^{-\lambda T} + 1 \right]^{-1} (r_i) = -\frac{1}{\lambda} \cdot \ln(1 - r_i) \quad (103)$$

Csonkított mintavételezés esetén, amikor csak  $0 - T$  között szeretnénk mintát sorsolni, ki kell számolnunk  $p_a$  értékét:

$$p_a = \lambda \int_0^T e^{-\lambda t} dt = 1 - e^{-\lambda T} \quad (104)$$

A mintavételezés a következőképp módosul:

$$t_i = -\frac{1}{\lambda} \cdot \ln \left( 1 - r_i \cdot \left( 1 - e^{-\lambda T} \right) \right) \quad (105)$$

### Megoldandó feladatok:

1. Forráskonvergencia számításnál létrehozott prekurzorok súlyai több nagyságrendben (5) eltér

A prekurzorokat a szakaszhatáron megállított prompt neutron eloszlásból számítjuk, a kellő mintaszám eléréséhez általában több időpillanat szükséges, mivel kevés prompt tartózkodik hasadóanyagban. Az előre meghatározott mintaszámot bár elérjük esetleg már 10-20 időpillanatból számítva, a prekurzorok súlyspektruma  $\Sigma_f$  energiafüggése miatt elég változatos lesz, erre kell megoldást találni.

Megoldási javaslat: Vegyünk még több időpillanatból mintát, vagyis gyártunk még több prekurzort, mint amire szükségünk lenne, aztán rulettezzük ki a kis súlyúakat.

Nyitott kérdések: Jó egyáltalán a prekurzor becslőnk?, Pontosan mennyi legyen akkor ez a több minta?, Mennyi legyen az átlagsúly a rulett után?

### 2. Kényszerített bomlás

A szakasz elején lévő prekurzorok közül valamennyit szeretnénk megtartani, valamennyit pedig elbomlasztani a szakaszban.

Megoldási javaslat: A bomlást későneutroncsopporttól függetlenül  $\lambda' e^{-\lambda' t}$  sűrűségfüggvényből sorsoljuk. Ekkor a szakaszba kerülő későneutronok száma várhatóan  $M_c(1 - e^{-\lambda' \Delta t})$ , ahol  $M_c$  a szakasz elején ülő prekurzorok száma,  $\Delta t$  pedig a szakasz hossza.

Nyitott kérdések: Mi alapján válasszuk meg  $\lambda'$ -t? Teljesítményjárulékok alapján? Súlytermelés alapján? Először a promptokra hívjuk meg a kernel, ez alapján látjuk, hogy mennyi későneutronra van szükségünk?

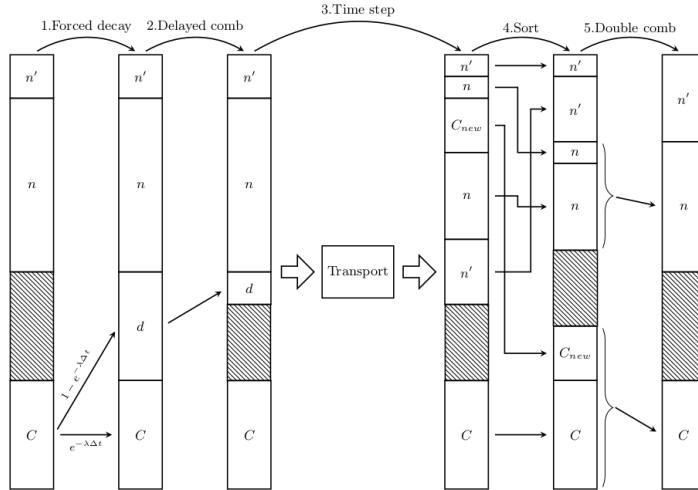
### 3. Későneutrontermelés szakaszon belül

A szakaszban egy külön reakcióként vesszük figyelembe a későneutrontermést, tehát egy hasadásban van esélye annak, hogy a neutron időtolást szenved (és új energiát is kap a későneutronspektrum szerint).

Megoldási javaslat: Válasszunk  $\lambda''$  paramétert az időtolás mintavételezésére  
Nyitott kérdések: Mi legyen  $\lambda''$ ?

### 4. Szakasz végén promptok és prekurzorok összefésülése

## 7. Algoritmusok



11. ábra. Egy időlépésben a neutron-tömb összetételének alakulása.

### 7.1. Forráskonvergencia

### 7.2. Prekurzor generálás

### 7.3. Véletlenszám generátor

Mint minden részecsketranszport szimulációban így itt is véletlen (álvályéletlen) számokra van szükségünk, ehhez a program a lineáris kongruencia módszerét használja, mely az MCNP5 (A General N-Particle Transport Code Version 5) tizenegyedik paraméter szettjével számol:

$$\begin{aligned}
 g &= 9219741426499971445 \\
 c &= 1; \\
 M &= 63; \\
 S &= 1; \\
 mod &= 2^M \\
 S &= (g \cdot S + c) \% mod.
 \end{aligned}$$

## 7.4. Energia keresés

Az energiarácsok rendezett tömbben adottak, meg kell határoznunk, hogy a neutron  $E$  energiája melyik két érték között található. Legyen adott egy  $n$  elemű  $A$  tömb a következő elemekkel:  $A_0 \dots A_{n-1}$ , ahol igaz, hogy  $A_0 \leq \dots \leq A_{n-1}$ . Az itt felvázolt algoritmus megkeresi az  $E$  energiát tartalmazó tartományt, és visszaadja az alsó érték indexét:

- Legyenek a kezdő értékek  $L = 0$  és  $R = n - 1$ .
- Amíg  $L <= R$ 
  - Legyen a középső elem értéke  $m$  a  $\frac{R+L}{2}$  kifejezés egészrészre.
  - Ha  $E <= A_m$  akkor legyen  $R = m - 1$ , egyébként  $L = m + 1$
- Ha a ciklus a végére ért, akkor  $L - 1$  lesz a tartomány alsó indexe, az interpolációs faktor pedig  $f = \frac{E - A_{L-1}}{A_L - A_{L-1}}$

## 7.5. Interpolációs sémák

Ha nincs megadva szakasz, akkor lineáris-lineáris. Ha van szakasz, akkor megkeressük az interpolációs régiót, itt pedig lehet:

- 1: Histogram

$$y = y_0 \quad (106)$$

- 2: Linear-linear

$$y = (y_1 - y_0) \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} + y_0 \quad (107)$$

- 3: Linear-log

$$y = (y_1 - y_0) \frac{\ln \frac{x}{x_0}}{\ln \frac{x_1}{x_0}} + y_0; \quad (108)$$

- 4: Log-linear

$$y = y_0 \cdot \left( \frac{y_1}{y_0} \right)^{\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}} \quad (109)$$

- 5: Log-log

$$y = y_0 \cdot \left( \frac{y_1}{y_0} \right)^{\frac{\ln \left( \frac{x}{x_0} \right)}{\ln \left( \frac{x_1}{x_0} \right)}} \quad (110)$$

## 7.6. Cella definíciók kibontása

Az első feladatunk, hogy a beolvasott definícióban ha található cella, akkor behelyettesítsük annak definícióját. Ez azért is lehet bonyolult, mert a hivatalos cellában is lehet cella, amit fel kell oldani. Természetesen ügyelnünk kell arra, hogy a kibontáskor ne szerepelhessen korábbi cella, mert akkor végtelen ciklusba kerülnénk.

### Negálás elvégzése

A követző lépésként el kell végeznünk a negálásokat. Ebben a lépésben két doleg történik, egyrészt kicseréljük a metszeteket uniókra, és fordítva, másrészt a felületek előjelét megváltoztatjuk.

### Fordított lengyel jelölés

A fordított lengyel jelölés (Reverse Polish notation) egy matematikai jelölés, ahol az operátorok az operandusok után állnak. A módszer nagy előnye, hogy az átalakítás során kapott kifejezés nem tartalmaz zárójeleket. Például a  $3+4$  kifejezést  $3\ 4\ +$ -ként jelöljük, ha több operátor is szerepel a kifejezésben, akkor az operátor rögtön a második operandus után következik, vagyis  $3-4+5$  kifejezés  $3\ 4\ -\ 5\ +$  alakban írandó.

### Shunting-yard algoritmus

Ezt az algoritmust használják szimbolikus matematikai műveletek megoldásához. Jelen esetben egy egyszerűsített verzióra van szükségünk, hiszen csak szorzás, osztás és zárójelfelbontás műveleteink vannak.

### Definíciók egyszerűsítése

Miután kibontottuk a fordított lengyel jelölést, el kell végeznünk az egyszerűsítéseket, vagyis a definícióból el kell távolítani az üres halmozokat, valamint az azonosságokat és a részhalmazokat.

## 7.7. Cella keresés

Minden szabadúthossz sorsolás után a neutron új koordinátája alapján meg kell határoznunk, hogy milyen anyagban található, vagyis melyik cellában van. Ehhez első lépésként a legfelső univerzum celláit nézzük végig, ha megtaláltuk a cellát, akkor három eset lehetséges, a legegyszerűbb, hogy a cella anyaggal van kitöltve, ekkor elérünk célunkat, és megtaláltuk a keresett anyagot. Második lehetőség, hogy a cella egy univerzummal van kitöltve, ekkor

az univerzumot alkotó cellákon lépelve megkeressük a megfelelőt. Harmadik esetben a cella ráccsal van kitöltve, ekkor első lépésként meg kell határoznunk, hogy a rács melyik elemében vagyunk, majd az elemet kitöltő univerzum összes celláján folytatjuk a keresést.

### Téglalaprács

Tekintsünk példának egy y-z síkú rácsot, legyen a rács egyik oldala mentén  $N_y dy$  hosszúságú elem, a másik mentén pedig  $N_z dz$  hosszúságú elem. Legyen a neutron az  $\underline{r} = (x, y, z)$  pontban.

$$I_y = \frac{y + \frac{d_y N_y}{2}}{d_y} \quad (111)$$

$$I_z = \frac{z + \frac{d_z N_z}{2}}{d_z} \quad (112)$$

Transzformáljuk a koordinatakat a az így kapott racselem középpontjának koordinata rendszerébe:

$$y = y - \frac{d_y N_y}{2} + I_y d_y + \frac{dy}{2} \quad (113)$$

$$z = z - \frac{d_z N_z}{2} + I_z d_z + \frac{dz}{2} \quad (114)$$

A rácsot kitöltő univerzumok indexét sorfolytonosan tároljuk, így a keresett univerzum a tömb  $I_y + I_z N_y$  eleme.

### Hatszögrács

Tekintsünk példának egy x-y síkú rácsot. A program kétféle hatszöget különböztet meg a "hex-x" látható a 12. ábra jobb olalán, ekkor a hatszög csúcsa x-irányba mutat, "hex-y" látható a bal olalon ekkor a csúcs y-irányba mutat.

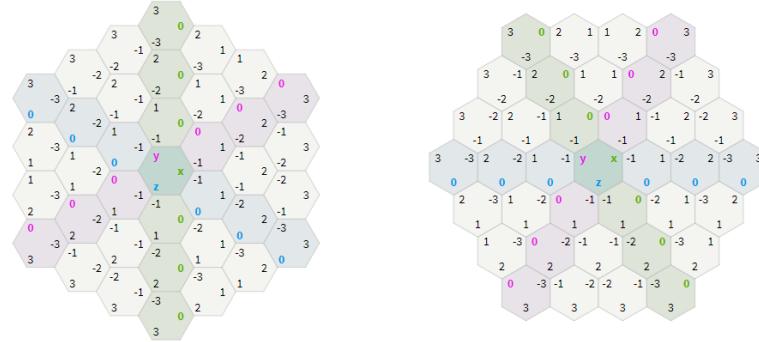
Annak érdekében, hogy a rács egyes elemeire egyértelműen hivatkozhassunk vezessük a 13. ábrán látható számozást.

Legyen a rács hex-y a tengelyek mentén  $N$  darab  $c$  oldalhosszúságú elemmel. Legyen a neutron az  $\underline{r} = (x, y, z)$  pontban.

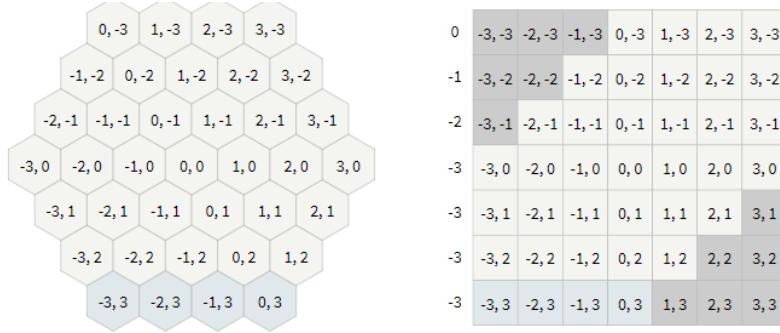
Első lépésként a pont koordinátáit át kell transzformálni a hatszögrács koordinátarendszerébe:

$$q = \frac{\sqrt{3}}{3c}x - \frac{1}{3c}y \quad (115)$$

$$r = \frac{2}{3c}y \quad (116)$$



12. ábra. A geometriai leíróban definiálható kétféle elrendezésű hatszögrács.



13. ábra. Hatszögrács celláinak indexelése.

Második lépésként határozzuk meg a "kocka" rendszerben az adott hatszög koordinátáit:

$$r_x = [q]$$

$$r_y = [r]$$

$$r_z = [-q - r]$$

$$x_{diff} = |[q] - q|$$

$$y_{diff} = |[r] - r|$$

$$z_{diff} = |[-q - r] - (-q - r)|$$

Ha  $x_{diff} > y_{diff}$  és  $x_{diff} > z_{diff}$

$$r_x = -[r] - [-q - r]$$

különben ha  $y_{diff} > z_{diff}$

$$r_y = -[q] - [-q - r]$$

különben

$$r_z = -[q] - [r]$$

transzformáljuk a koordinatakat a racs kozéppontjanak koordinata rend-

szerebe

$$x = x - \sqrt{3}cr_x + \frac{\sqrt{3}c}{2}r_y \quad (117)$$

$$y = y - \frac{3c}{2}r_y \quad (118)$$

Így a keresett univerzum a tömb  $(r_x + \frac{N}{2}) + (r_y + \frac{N}{2})N$  eleme.

## 7.8. Cella keresés gyorsítása

Bonyolult felépítésű geometriai elrendezések esetén a futási idő jelentős részét a cella meghatározása teszi ki. minden Woodcock-módszer lépésben a neutron adott helyen lévő pontjában meg kell határoznunk, hogy az a pont melyik cellába esik, ehhez pedig minden a legfelső univerzumból indulva hajtjuk végre a cellakeresést. Ennek gyorsítására egy adott felbontású rácsban meghatározzuk a kezdő cellát, univerzumot vagy rácsot, ahonnan a keresés indul. Legszerencsébb esetben a teljes voxel lefedи az adott cella, ilyenkor nem is hajtunk végre keresés, az algoritmus visszaadja a cellát kitöltő anyagot. Legrosszabb esetben a legfelső univerzumban kezdjük a keresést. A kezdőpont típusa és az index mellett tároljuk továbbá, azt is, hogy az adott pontra milyen transzformációkon keresztül jutottunk el, és ezeket a transzformációkat végre is hajtjuk az adott neutronon.

Az algoritmus első lépéseként a voxel középpontjában meghatározzuk a megadott mélységig a keresés útvonalat és elmentjük minden szinten a cellát kitöltő objektum típusát, indexét és transzformációját. Ezután a voxelből egyenletes térbeli eloszlással mintákat veszünk, és ezek útvonalát összehasonlítjuk a referencia útvonalával. Az összes mintára vett útvonalak utolsó közös pontja lesz a cella kereső algoritmus kezdőpontja.

## 7.9. Transzformációk

A transzformációk esetén az indexen kívül megadható az eltolás vektor és a forgatás mátrix. Legyen az eredeti koordinátarendszer  $x, y, z$  az új pedig  $x', y', z'$ , a forgatás mátrix elemei az egyes tengelyek általál bezárt szöggel adható meg, vagyis:

$$B = \begin{bmatrix} \alpha(x, x') & \alpha(y, x') & \alpha(z, x') \\ \alpha(x, y') & \alpha(y, y') & \alpha(z, y') \\ \alpha(x, z') & \alpha(y, z') & \alpha(z, z') \end{bmatrix}$$

## Felületek

Felületek transzformációja esetén még a CPU-n átalakítjuk a felületet kvadratikus alakra, majd itt el is végezzük az eltolást és a forgatást. (Tórusz nem forgatható!)

## Cellák

A cellák transzformációja esetén a transzformációs mennyiségek átkerülnek a GPU-ra és futás közben transzformáljuk a részecske koordinátáját a cellakereső algoritmuson belül.

### 7.10. Event-based kernel

Az eljárás alapötlete, hogy a GPU-n futó kódot szétszedjük az energiatörvények szerint, és minden energiatörvényt külön kernel fog számolni, így a különböző kernelek nagyjából ugyanazt az algoritmust fogják használni, így szálak szétrázódása elméletileg csökkenthető. Az algoritmus első lépése, hogy minden neutronra meghívjuk a transzport kernelt, amiben található a Woodcock-módszer, a reakció- és a prekurzor sorsolás. A kernel végén egy külön tömbben eltároljuk a részecske indexét valamint, és hogy milyen reakciót sorsoltunk neki, illetve számoljuk, hogy az egyes törvényekből hány darabot sorsoltunk.

A kernel végeztével a *thrust::sort\_by\_key* függvényt használva sorba rendezzük a neutronok indexét a sorsolt energiatörvény szerint. Abból, hogy melyik reakcióból hányat sorsoltunk kiszámoljuk, hogy a rendezett tömbben hol kezdődnek az egyes törvényekhez tartozó neutron indexek. Ezután pedig meghívjuk a törvényekhez tartozó kerneleket a tömbben található neutronok indexeire.

Ezt addig folytatjuk, míg a neutron el nem hagyja a geometriát vagy túl nem megy az időbeli szakaszhatáron.

Minden kernelre a *cudaOccupancyMaxPotentialBlockSize* függvényét használjuk az optimális blokkméret meghatározására.

- Előnyök

- 1-1 kernelnek kevesebb regiszterre van szüksége, ha kifogy a regiszterből, globális memoriában kell tárolni a változót, aminek elérés jelentősen lassabb.
- Elméletileg minden egyes reakció után be tudunk avatkozni spilt-teléssel vagy orosz rulettel
- Lehet használni k-effektív becslésre

- Hátrányok

- Sorba kell rendezni a neutronokat az energia törvény száma szerint
- A sokat ütköző neutronok nagyon kevesen lesznek, így a szakasz végén csak pár részecskére fogjuk meghívni a kerneleket.

### 7.11. Prekurzorok és késő neutronok

- Forráskonvergencia

Homogén forráseloszlásból a settings fájlban megadott ideig hagyjuk futni a szimulációt, egyenlőre jó leállási feltételünk nincs.

- Prekurzor generálás

A forráskonvergenci után az egyes szakaszok végén minden prompt neutron esetén megnézzük, hogy a szakasz végének időpontjában éppen milyen anyagban volt, ha prekurzor bomló izotóp van az adott helyen, akkor egyenletes eloszlással mintát veszünk a prekurzor csoportokból a következő súlyval:

$$w_{precursor} = w_{prompt} \cdot K v \frac{\beta \nu \Sigma_f}{\lambda} \quad (119)$$

ahol  $w_{precursor}$  a precursor minta súlya,  $w_{prompt}$  a prompt neutron súlya,  $v$  a neutron sebessége,  $K$  a prekurzor csoportok száma,  $\beta$  a későneutronhányad,  $\nu$  a keletkezett neutronok száma,  $\Sigma_f$  a hasadási hatáskeresztmetszet,  $\lambda$  a bomlási állandó. Mivel a későneutron reakciókat különálló reakciókként kezeljük és populációkontrollt használunk, ezért a "hatáskeresztmetszetben" eleve benne van a  $\beta$  és a  $\nu$  is. A prekurzorok súlyát le kell osztani a generáláshoz felhasznált szakaszok számával.

- Szimuláció

- szimuláció a prompt és a késő neutronokkal A szakasz minden reakcióval kezdődik és szabad-úthossz sorsolással végződik.
- prekurzorok bomlasztása a következő szakaszba Jelenleg a prekurzorokat  $P = 0.5\%$  esélyes sorsoljuk be a következő szakaszba. Ehhez a következő szakasz végéig hátra lévő idő alapján választunk egy  $\lambda'$  paramétert:  $\lambda' = -\frac{\ln(1-P)}{T-t}$ , ez alapján mintavételezünk egy  $\Delta t = -\frac{\ln(r)}{\lambda'}$  időkülönbséget, ha a sorsolt idővel a neutron túlmegy a határon, akkor a ideje a határ ideje lesz és a súlyát kompenzáljuk:  $w = w \cdot e^{-(T-t)(\lambda-\lambda')}$ , ezzel marad prekurzor. Ellenkező

esetben növeljük az idejét a  $\Delta t$  idővel, és korrigáljuk a súlyát:  $w = w \cdot \frac{\lambda}{\lambda'} e^{-\Delta t(\lambda - \lambda')}$  faktorral, és ekkor kikerül a prekursor stá-tuszából. Ekkor sorsolunk neki új energiát és irányt a hozzá tartozó eloszlásokból, valamint új szabadúthosszat sorsolunk.

- neutronok sorba rendezése az idejük szerint, és megszámlálása a következő szakaszba került prompt, az összes precursor és késő neutronoknak.
- prompt neutronok fésülése
- prekurzorok fésülése

## 7.12. Adjungált függvény becslése

Az adjungált függvényt a következőképpen definiáljuk: az adott térbeli pontból és energiáról indulva a neutron minden valószínűsséggel okoz hasadást.

A legkisebb és legnagyobb energia közötti tartományt logaritmikusan osztjuk fel, és ezekben az energiacsoportokban készítjük azonos térbeli felbontással az adjungált térképet.

Minden voxelből mintákat veszünk, az energiacsoportban egyenletesen sorsolt kezdőértékkel. Ezután addig követjük a neutronokat, amíg nem hasadnak, nem szöknek ki, vagy túl nem lépik a megadott időhatárt. Az adjungált értéke a minták átlagsúlya lesz.

A generálás felgyorsítására a nagyobb energia csoportokban ha a neutron energia a csoport mimimuma alá csökken, akkor a korábban kiszámolt megfelelő adjungáltat használjuk fel, és nem követjük tovább a részecskét.

## 7.13. $k_{eff}$ becslés

$$k_{eff} = \frac{\text{fission neutrons in generation } i + 1}{\text{fission neutrons in generation } i} \quad (120)$$

## 7.14. $k_d$ becslése

$$k_d = \frac{\sum_i P_i^{\Delta t}}{\sum_i L_i^{\Delta t}} \quad (121)$$

## 8. Szóráscsökkentés

The biasing schemes for Monte Carlo particle transport can be divided into three major categories: source biasing, transport biasing (e.g., splitting/roulette and exponential transformation), and collision biasing (e.g., discrete-angle biasing, forced collisions, and implicit capture). As the names suggest, the three methods bias the source-sampling, transport, and collision processes, respectively.

### 8.1. Populáció-kontrol

A torzítás első lépéseként a reakciókhöz tartozó hatáskeresztmetszetet kicseréljük a keletkező neutronok száma és a hatáskeresztmetszet szorzatára. A reakciót a módosított értékek alapján sorsoljuk, majd minden esetben kompenzáljuk a súlyt. Vegyünk példának egy izotópot, melynek van rugalmas szórása  $\Sigma_s(E)$  és két neutróntermelő reakciója  $\Sigma_{f1}(E)$  és  $\Sigma_{f2}(E)$ , így az egyes reakciók esetén a súlyok változása a következő:

$$w_{f1}(E) = \frac{\nu_1(E)\Sigma_{f1}(E)}{\Sigma_t(E)} \frac{1}{q_1(E)} \quad (122)$$

$$w_{f2}(E) = \frac{\nu_2(E)\Sigma_{f2}(E)}{\Sigma_t(E)} \frac{1}{q_2(E)} \quad (123)$$

$$w_s(E) = \frac{\Sigma_s(E)}{\Sigma_t(E)} \frac{1}{q_3(E)} \quad (124)$$

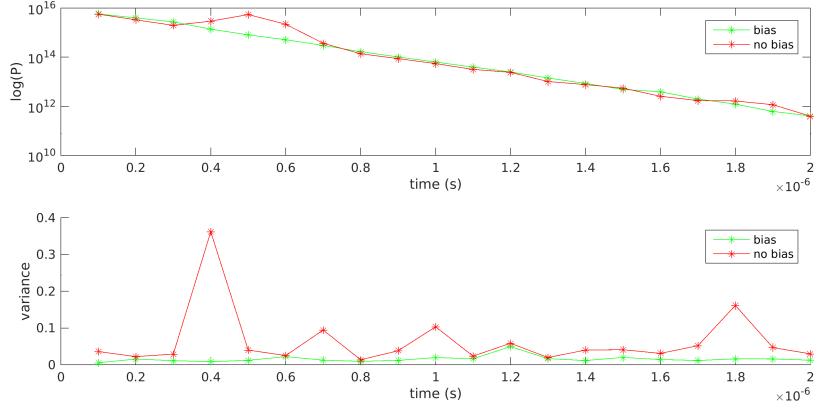
A  $q$  értékek jelentik az új valószínűséget, vagyis az új hatáskeresztmetszetet kell leosztani a hatáskeresztmetszetek összegével, így a súlyváltozásokból kiegyszerűsödnek a reakcióhoz tartozó valószínűségek, és egy energián minden reakcióra ugyanaz az érték lesz.

$$w_s(E) = w_{f1}(E) = w_{f2}(E) = \frac{\Sigma_s(E) + \nu_1(E)\Sigma_{f1}(E) + \nu_2(E)\Sigma_{f2}(E)}{\Sigma_t(E)} \quad (125)$$

$\nu$  the following way:  $\nu = 0$  for capture reaction,  $\nu = 1$  for non-multiplying reactions,  $\nu = x$  for ( $n$ ,  $xn$ ) reactions, and  $\nu = \nu(E)$  for fission reactions.

$$P_i = \frac{\nu_i \Sigma_i}{\sum_j \nu_j \Sigma_j} \quad (126)$$

$$w' = w \frac{\sum_j \nu_j \Sigma_j}{\Sigma_t} \quad (127)$$



14. ábra. Teljesítmény logaritmusa és a szórás torzítással és nélküle.

## 8.2. Szakaszonkénti fésülés

Mivel egy szakaszon belül a neutronok eltérő számú ütközésben vesznek részt és reakciótól függően változik a súlyuk, ezért a szakasz végére jelentős különbségek lehetnek a súlyokban, ezért ilyenkor fésülést végzünk. Kétféle módszert valósítottunk meg a súlyok fésülésére a GPU-n, ezeket ismertetjük a következő alfejezetekben.

### 8.2.1. Egyenlő súlyok módszere

Az első algoritmus [21]-ban található fésülés eljárás alapján készült. Első lépésként a súlyokból egy kumulatív tömböt készítünk a *thrust::inclusive\_scan* CUDA függvény segítségével, ezután hajtjuk végre a fésülést.

$$t_m = \frac{r + m}{M} \sum_{i=1}^M w_i \quad (128)$$

ahol  $r$  véletlen szám,  $N$  a neutronok száma, és  $m$  az új neutronok indexe  $m = 0, \dots, M$ . Az így kapott  $t_m$  értéket meg kell keresnünk a legenerált kumulatív tömbben, ehhez bináris keresést alkalmazunk, majd az így kapott indexű neutron adatait kell bemásolni a megfelelő helyre. minden részecske súlyát az átlagra módosítjuk.

$$w' = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N w_i \quad (129)$$

### 8.2.2. Adjungált alapú módszer

$$w'_i = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N w_i I_i \quad (130)$$

### 8.2.3. Összehasonlítás

## 9. Verifikáció

A Guardyan validálására az MCNP-t (A General Monte Carlo N-Particle Transport Code [19]) használjuk. Az összehasonlítás úgy történik, hogy 412 izotópra (a metastabilokon kívül mindenekre, ami az *ENDF/B-VII.1* 293.6 K hőmérséklethez elérhető) egy homogén gömb közepéről indítva a neutronokat öt különböző energiával ( $18, 1, 10^{-3}, 10^{-6}, 10^{-8}$  MeV), vizsgáljuk a gömbfelületet elhagyó neutronok időbeli- és energia szerinti eloszlását. A különböző izotópok sűrűségénél a természetes előfordulásuk sűrűségét vettük alapul.

### 9.1. Guardyan futtatása

Első lépésként a Guardyan inicializáló függvényét hívjuk meg, mely a neutronok kezdeti energiájára meghatározza a szabad úthosszat, és a gömb sugarát ez alapján állítjuk be ennek az értéknek a háromszorosára. A szimuláció ideje, az ennek az útnak a kezdősebességgel való megtételehez szükséges idő százszorosa. Ha ezeket beállítottuk, futtatjuk a részecske transzportot, és ezután feldolgozzuk a gömbfelületen átlépő neutronokat.

### 9.2. Tally-k meghatározása

A transzportból kapott kiszökött neutronokat a sebesség ismeretében vissza-transzformáljuk a gömbfelületre. Az így kapott idők, és energiák közül kiválasztjuk a legkisebbet és a legnagyobbat, és a tally-ket úgy állítjuk elő, hogy az energiát logaritmikusan 24, az időt 9 részre osztjuk. Ezután legyárjuk az MCNP bemeneti fájlját, majd meghívjuk az *mcnp6*-ot.

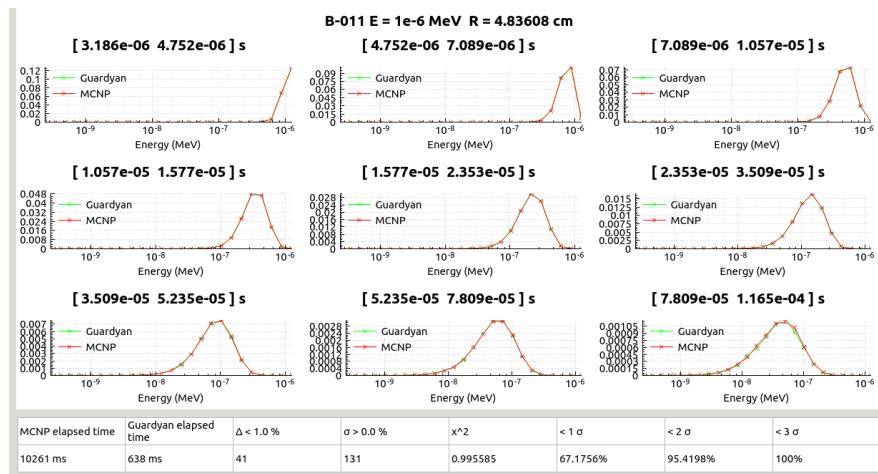
### 9.3. MCNP futtatása

Az MCNP input fájljába a korábban meghatározott sugarú és sűrűségű gömböt definiáljuk az adott izotóphoz és kezdőenergiához. A neutronok a gömb középpontjából indulnak, a tally-k pedig az előző pontban bemutatottak alapján készül. A *PHYS:N jj 1* sorral kikapcsoljuk a *unresolved resonance probability tables* adatokkal való korrekciót, az orosz rulett paramétereinek pedig *CUT:n 7.86409 j 2e-10 1e-10* sorral állítjuk be, ahol az első tag az időkorlát. Az eredmények könnyebb feldolgozhatósága érdekében mctal fájlt is kiiratjuk a *PRDMP jj -1* sorral.

## 9.4. Eredmények kiértékelése

Minden izotóphoz és kezdőenergiához a 15. ábrán látható kép tartozik. Legfelül látható az izotóp neve, a kezdő energia és a gömb sugara, alatta a kilenc különböző szakaszban a felületet elhagyó neutronok energia szerinti eloszlása látható. Legalul egy táblázat tartalmazza a futási időket, azt hogy hány elem található 1 %-os pontosságon belül, hány nem nulla adatpontunk van,  $\chi^2$  értéke, valamint, hogy hány adatpont található  $1,2,3 \sigma$ -n belül.

$$\chi^2 = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \frac{(y_{m,i} - y_{g,i})^2}{\sigma_{m,i}^2 + \sigma_{g,i}^2} \quad (131)$$

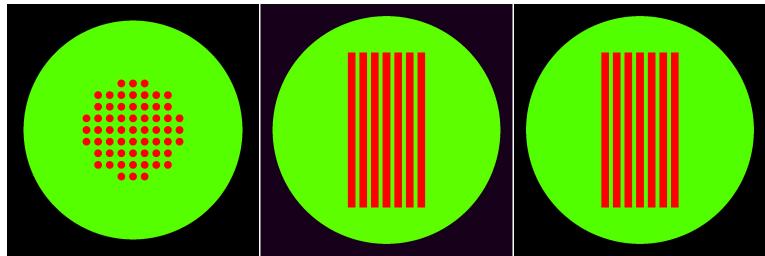


15. ábra. Validációs eredmények  $^{11}B$  isozópra 1eV induló energián.

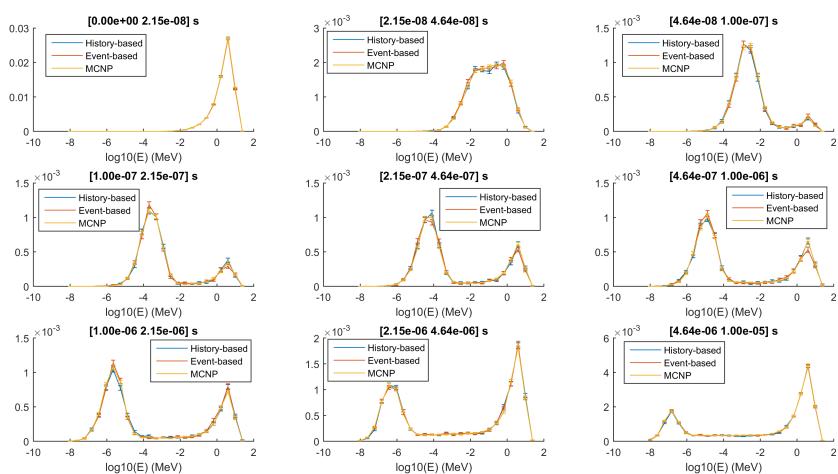
A validációt összesen 412 izotópra, 5 energiára, 9 idő- és 24 energia szerinti osztással végeztük, vagyis összesen 444960 adatpontot hasonlítottunk össze.

## 9.5. Urán-oxid rudak víz gömbben

A homogén anyageloszlás tesztelése után inhomogén eseteket vizsgáltunk. Ebben az elrendezésben egy víz gömbbe rácsba rendezve helyeztünk el 61 urán-oxid rudat, a geometria szeleti képei láthatóak a 16. ábrán. Az előzőekhez hasonlóan az MCNP-vel való összehasonlításhoz a gömböt elhagyó neutronok energieloszlását hasonlítottuk össze, ennek eredménye látható a 17. ábrán.



16. ábra. Víz gömbben elhelyezett urán-oxid rudak szeleti képei.

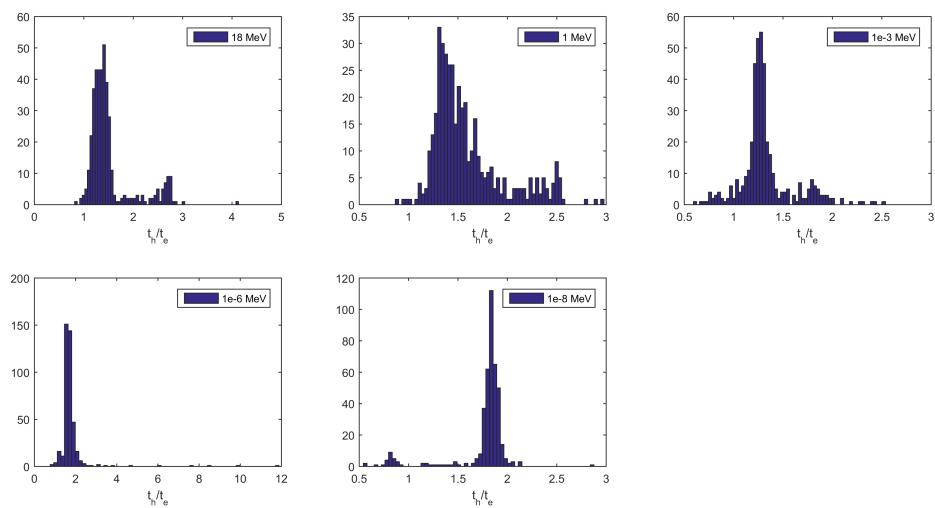


17. ábra. A gömbfelületet elhagyó neutronok energiaeloszlása MCNP-vel, valamint Guardyan-nel event-based és history-based esetben.

## 10. History- és event-based összehasonlítás

### 10.1. Izotópok

A kétféle módszer összehasonlításához az validációban használt izotópok be-meneti fájljait használjuk fel, annyi módosítással, hogy a neutronszámot tízenhatszorosára növeltük. A futtatás során a kernel futási időket gyűjtöttük ki, a 18. ábrán a history- és az event-based idők hánnyadosának hisztogramjai láthatóak a különböző induló energiákon az összes izotópra.



18. ábra. y-tengelyen a kernel futási idők aránya látható.

### 10.2. Urán rudak víz gömbben

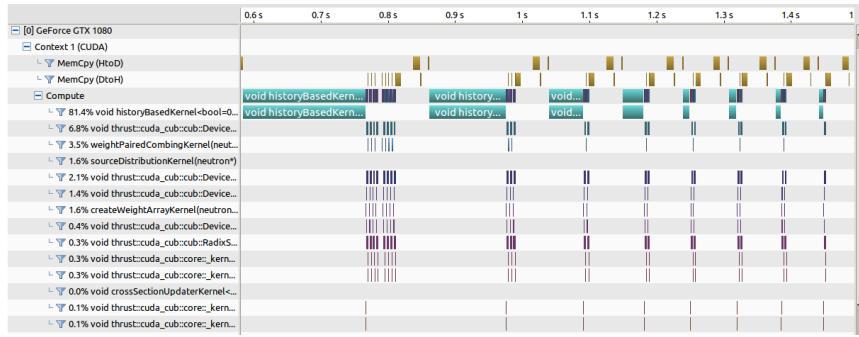
A 9.5. fejezetben bemutatott esetben hasonlítottuk össze a két módszer futási idejét. Teljes futási idők:

Event-based: 6m13.230s

History-based: : 6m43.730s

MCNP: 39m54.261s

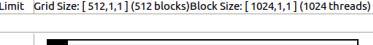
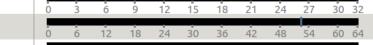
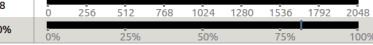
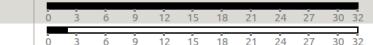
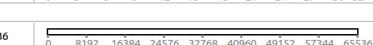
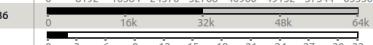
# 11. Futási idő optimalizáció I.



19. ábra. NVIDIA Nsight timeline

## 11.1. Regiszter szám csökkentése

Grafikus kártyákban elérhető memóriák közül a leggyorsabb a regiszter, azonban ebből is korlátozott számú áll rendelkezésre. A jelenleg használt compute capability és kártyák mellett a szálankénti limit 255 32 bites regiszter, emellett blokkonként limit is van, 65536. Ahhoz, hogy a program minél hatékonyabb legyen, egy blokkon belül a lehető legtöbb szálat használnunk kell, akkor kapjuk a leghatékonyabb kódot, ha szálanként maximum 32 32 bites regiszter használunk, ez dupla pontosság esetén 16 double változót jelent.

Variable	Achieved	Theoretical	Device Limit	Grid Size: [ 512,1,1 ] (512 blocks) Block Size: [ 1024,1,1 ] (1024 threads)
<b>Occupancy Per SM</b>				
Active Blocks	2	32		
Active Warps	52.21	64	64	
Active Threads	2048	2048		
Occupancy	81.6%	100%	100%	
<b>Warp</b>				
Threads/Block	1024	1024		
Warps/Block	32	32		
Block Limit	2	32		
<b>Registers</b>				
Registers/Thread	32	65536		
Registers/Block	32768	65536		
Block Limit	2	32		

20. ábra. NVIDIA Nsight occupancy

Az alábbi táblázatban a SVN 229 és 234-es verzió összehasonlítása láttható az egyes kernelekben használt regiszter számokat tekintve, cuda 9.0-val 384.98-es nvidia driver-rel.

4. táblázat: Regiszter számok optimalizáció előtt és után.

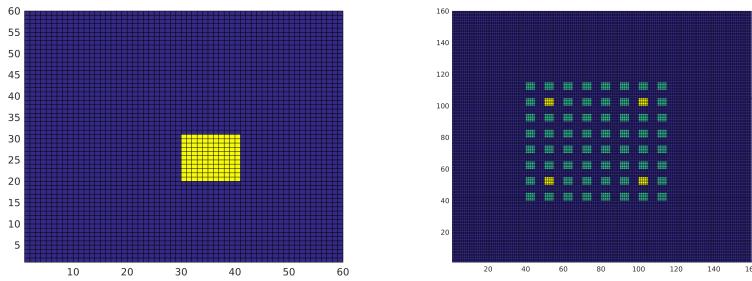
Kernel	Régi regiszter szám	új regiszter szám
History based	112	100
Transport	98	108
Elastic	71	63
ACE Law 3	80	58
ACE Law 4	66	63
ACE Law 7	76	68
ACE Law 9	72	64
ACE Law 11	74	68
ACE Law 44	68	62
ACE Law 61	72	66
ACE Law 66	62	58

## 12. Futási idő optimalizáció II.

Ebben a fejezetben különböző Woodcock-módszer torzítási technikákat mutatunk be kétdimenziós geometriákon MATLAB-ban.

### 12.1. A vizsgált modell

A vizsgálatokhoz kétféle geometriai elrendezést használtunk, ezek a 21. ábrán láthatóak. Az egyszerűbb esetet mutatja a bal oldali ábra egy detektorral  $60 \times 60$  cm-es méretben ( $\Gamma_0$ ), míg a jobb oldalon a bonyolultabb geometria látható hatvan detektorral és négy abszorbenssel  $160 \times 160$  cm-es méretben ( $\Gamma_1$ ).



21. ábra. A két geometria anyagtérképe.

Mindkét geometria esetén a részecskék sebességét  $v = 1 \frac{cm}{s}$ -nak tekintetük, a szimuláció  $T = 50s$ -ig tartott. A hatáskeresztmetszet adatokat az 1. táblázatban foglaltuk össze.

1. táblázat: Hatáskeresztmetszet adatok az egyes geometriák esetén.

Geometria	$\Sigma_t (1/cm)$	$\Sigma_a (1/cm)$	$\Sigma_s (1/cm)$	$\Sigma_f (1/cm)$
$\Gamma_0$	[0.2 0.4]	[0.05 0.0]	[0.15 0.0]	[0.0 0.4]
$\Gamma_1$	[0.01 0.02 0.05]	[0.002 0.0 0.04]	[0.008 0.0 0.01]	[0.0 0.02 0.0]

$\Sigma_f$  a jelenlegi közelítésben a detektálás hatáskeresztmetszetét jelenti, detektálás esetén a részecskét nem követjük tovább. A becslésekhez minden homogén forráseloszlásból indultunk ki és szórás esetén egyenletes eloszlásból sorsoltunk új irányt.

### 12.2. Adjungált és $\Sigma_Z$ számítás

Az adjungált meghatározásához az adott geometria minden térfogatelemből  $N$  darab részecskét szimulálva meghatározzuk az onnan leadott összes járulé-

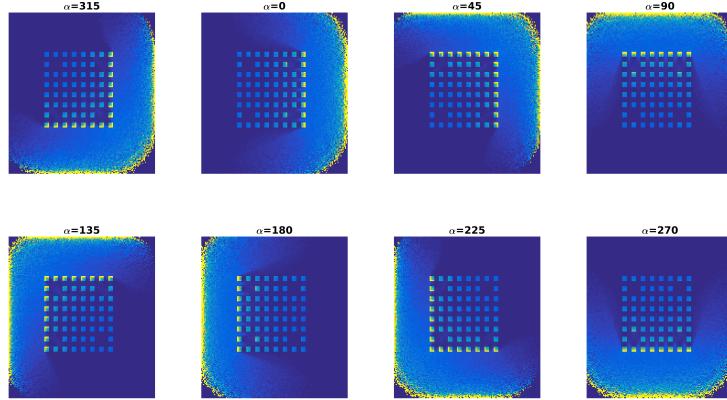
kot, majd leosztunk a térfogatelemből vett minták számával. A  $\Sigma_Z$  számítás

$$\Sigma_Z(x) = \frac{\Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(x') dx'}}{\int_x^a \Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(x') dx'} \phi^+(x) dx} \quad (132)$$

egyenlet alapján történik, ahol a nevezőben található integrált úgy végezzük el, hogy Woodcock-módszer alapján  $N$  darab  $d_i$  valós ütközési pontot mintavételezünk az adott  $(x, y)$  pontból.

$$\Sigma_Z(x, y, \alpha) = \frac{\Sigma(x, y) \phi^+(x, y)}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi^+(x + d_i \cos \alpha, y + d_i \sin \alpha)} \quad (133)$$

A 22. ábrán látható nyolc különböző irányra számolt  $\Sigma_Z$  eloszlása a  $\Gamma_1$  geometria esetén. Annak érdekében, hogy a negatív súlyokat elkerüljük a lokális teljes hatáskeresztmetsznél kisebb értéket sehol sem engedünk meg.



22. ábra.  $\Sigma_Z$  a különböző irányokban számolva.

Az ábrák alapján levonhatunk néhány fontos következtetést  $\Sigma_Z$ -re vonatkozóan:

- A geometria széle felé haladva, a detektoruktól távolodva  $\Sigma_Z$  értéke nő, vagyis "sűríti" a közeget, és ütközésre kényszeríti a részecskét
- Az abszorbensek felé haladva a detektorban nő a  $\Sigma_Z$  értéke.

Megjegyzés: az adjungált és a  $\Sigma_Z$  számolását pontosíthatjuk úgy, hogy a  $\Sigma_Z$  virtuális ütközéseként adjon járulékot az adjungált pedig minden valós ütközésben.

## 12.3. Torzítási lehetőségek a Woodcock-módszerben

Ebben a fejezetben háromféle esetet mutatunk be, amivel módosíthatjuk a Woodcock-módszerben használt mintavételező hatáskeresztmetszetet és az elfogadás valószínűségét.

### 12.3.1. Woodcock-módszer

A refenciánk amihez hasonlítunk a hagyományos Woodcock-módszer, mely esetén meghatározzuk a majoráns hatáskeresztmetszetet a geometriára, majd egy  $r$  véletlenszám segítségével egy  $d$  távolságot sorsolunk az  $(x, y)$  pontból:

$$d = \frac{-\ln(r)}{\Sigma_{maj}} \quad (134)$$

a kapott értéket pedig  $q$  valószínűséggel elfogadjuk:

$$q = \frac{\Sigma_t(x + d \cos \alpha, y + d \sin \alpha)}{\Sigma_{maj}} \quad (135)$$

$1 - q$  valószínűséggel virtuális ütközés következik be, ekkor újabb mintát kell sorsolni.

### 12.3.2. Implicit befogás

Ebben az esetben az elnyelés korrekcióját valós ütközés helyett a virtuális ütközésekben korrigáljuk. Ekkor a távolság sorsolása nem változik, vagyis (134) egyenlet alapján történik. A valós ütközés valószínűsége azonban a következőképpen módosul:

$$q = \frac{\Sigma_f(x, y) + \Sigma_s(x, y)}{\Sigma_{maj}} \quad (136)$$

A súlykorrekciót minden virtuális ütközésben végre kell hajtani:

$$w = w \cdot \frac{\Sigma_{maj} - \Sigma_t(x, y)}{\Sigma_{maj} - \Sigma_f(x, y) - \Sigma_s(x, y)} \quad (137)$$

valós ütközés esetén nincs szükség súlykorrekcióra.

### 12.3.3. Adjungált függvény használata

A korábban kiszámolt  $\Sigma_Z$  értékeket itt használjuk fel, méghozzá úgy, hogy a majoráns helyett a  $\Sigma_{samp}$  mintavételező hatáskeresztmetszetet használunk a távolság mintavételezésére:

$$d = \frac{-\ln(r)}{\Sigma_{samp}} \quad (138)$$

az elfogadási valószínűséget pedig  $\Sigma_Z$ -vel arányosan választjuk meg:

$$q = \frac{\Sigma_Z(x + d \cos \alpha, y + d \sin \alpha, \alpha)}{\Sigma_{\text{samp}}(x, y, \alpha)} \quad (139)$$

ekkor valós ütközés esetén a súlykorrekció:

$$w = w \cdot \frac{\Sigma_t(x, y)}{\Sigma_{\text{samp}}(x, y, \alpha)} \frac{1}{q} \quad (140)$$

virtuális ütközés esetén pedig:

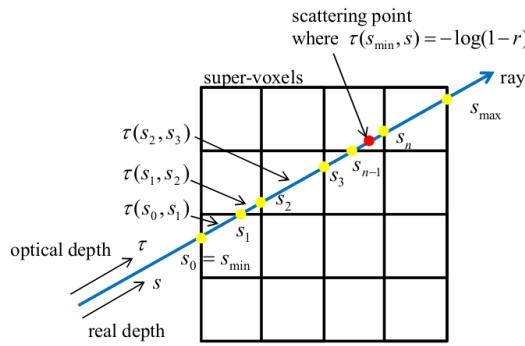
$$w = w \cdot \left(1 - \frac{\Sigma_t(x, y)}{\Sigma_{\text{samp}}(x, y, \alpha)}\right) \frac{1}{1 - q} \quad (141)$$

A módszer hátránya, hogy  $\Sigma_{\text{samp}}$ -ot úgy kell megválasztani, hogy az az adott irányban majorálja a lehetséges  $\Sigma_Z$  értékeket és ne kapunk negatív súlyokat.

Fontos megjegyezni, hogy a  $\Sigma_{\text{samp}}(x, y)$  választásnál figyelni kell, hogy ne egyezhessen meg a  $\Sigma_t(x, y)$  értékkel, ekkor ugyanis a virtuális ütközés esetén a részecske súlyát nullával szorozzuk.

#### 12.3.4. Ray tracing

A módszer lényege, hogy a geometriát felosztjuk nagyobb voxelekre, és minden térfogatelemben meghatározzuk a majoráns hatáskeresztmetszetet.



23. ábra. Egy egyenes és a rács metszéspontjai [22].

A 23. ábra alapján az algoritmus a következő: először sorsoljuk ki az elfogyasztandó optikai szabad úthosszat:

$$s = -\ln(1 - r) \quad (142)$$

ahol  $r$  egyenletesen választott véletlen szám a  $[0, 1]$  intervallumon. Ezután határozzuk meg, hogy melyik rácselemben található a részecske, és mekkora a legközelebbi határtól vett távolság:

$$d_x = \left| \frac{n_x d_x - x}{v_x} \right|, \text{ ahol } n_x = \left\lfloor \frac{x}{d_x} \right\rfloor \quad (143)$$

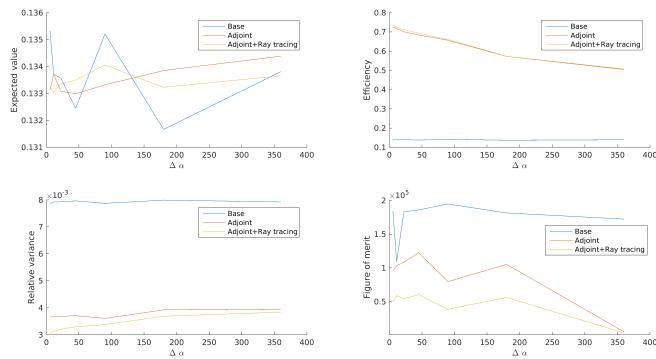
Az adott helyen lévő majoráns alapján számoljuk ki a szabad úthosszat:  $d = \frac{s}{\Sigma_{maj}}$ , amennyiben ez kisebb, mint a cella határától vett távolság, elfogadjuk a helyet virtuális ütközésként, ha nem, akkor levonjuk az optikai szabad úthosszból a határig vett távolság és a hatáskeresztmetszet szorzatát:  $s = s - d \cdot \Sigma_{samp}$ , ha  $v_x > 0$  akkor  $n_x$  értékét egyelőre növeljük egyébként egyelőre csökkentjük, és mindenkor addig folytatni amíg el nem fogyasztjuk az optikai szabad úthosszat.

## 12.4. Paramétervizsgálat

Ebben a fejezetben az adjungált alapú módszer stabilitását vizsgáljuk különböző paraméterek változtatása esetén.

### 12.4.1. Irány szerinti felbontás

Először is azt vizsgáltuk, hogy milyen hatása van a szórásra annak, ha a  $\Sigma_Z$  irány szerinti felbontását finomítjuk. Az irány szerinti felbontás függvényében mutatja a 24. ábra a várható értéket, a hatásfokot, a relatív szórást és a Figure of Merit-et.

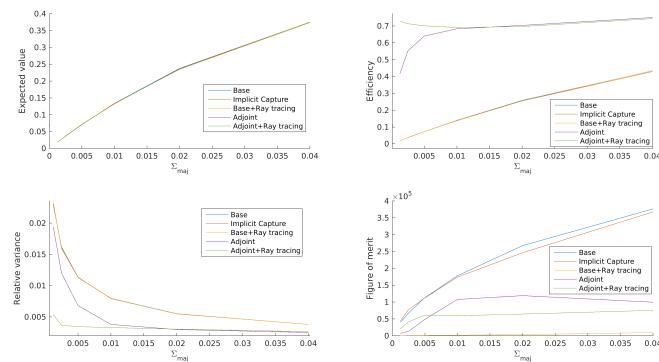


24. ábra.  $\Sigma_Z$  irány szerinti felbontásának függvényében az egyes módszerek eredményei.

Az ábrán három módszer eredménye látható, *Base* az eredeti Woodcock-módszer, mely független a  $\Sigma_Z$ -től, az adjungált függvény alapú és az adjungált függvényt a ray tracing-gel kiegészítve. Az eredmények alapján megállapítható, hogy a  $\Sigma_Z$  és  $\Sigma_{\text{maj}}$  irányfüggését első közelítésben el is hanyagolhatjuk, hiszen az alap módszerhez képest az irányfüggetlen kétszer jobb relatív szórást ad, a pontosabb szög szerinti felbontással kisebb szórást kapunk, de nem mondható jelentősnek a javulás.

#### 12.4.2. Teljes hatáskeresztmetszet

Ebben a fejezetben azt vizsgáltam, hogy az egyes módszerekre milyen hatása van a teljes hatáskeresztmetszet változásának.



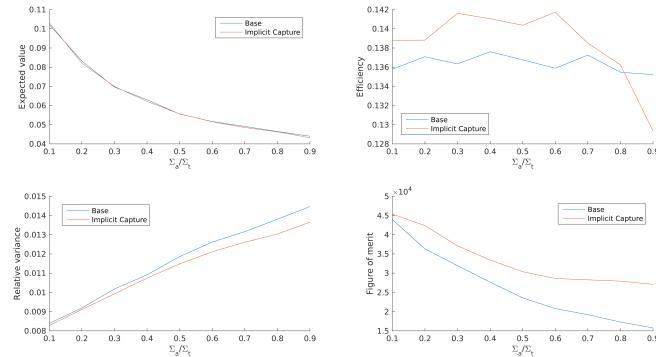
25. ábra. Várható érték, hatásfok, relatív szórás és Figure of merit a majoráns hatáskeresztmetszet függvényében.

#### 12.4.3. Abszorpciós hatáskeresztmetszet

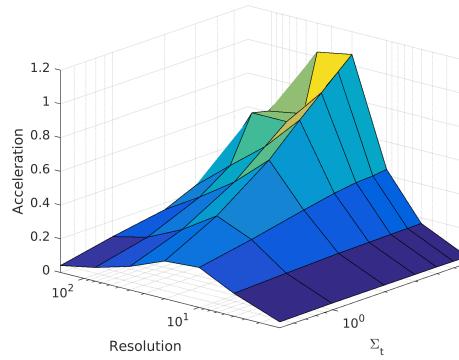
A Woodcock-módszerbe ágyazott implicit befogást teszteltük különböző abszorpciós arányának függvényében. A 26. ábrán a szórás és a FoM értékek alapján látható, hogy a módszer javítja a szórást és jelentős javulást mutat FoM értékekben.

#### 12.4.4. Ray tracing rács felbontása

Ebben az esetben azt vizsgáltuk, hogy a ray tracing esetén használt rács felbontásának változtatása és a majoráns hatáskeresztmetszet módosítása milyen hatással van a két módszer futási idejére, vagyis van-e olyan nagy majoráns, ahol megéri a sok számolást a ray tracing módszer.



26. ábra. Várható érték, hatásfok, relatív szórás, és Figure of merit értékek az abszorbcí függvényében.



27. ábra. Futási idők aránya a majoráns tömb mérete és az abszorbens teljes hatáskeresztmetszete.

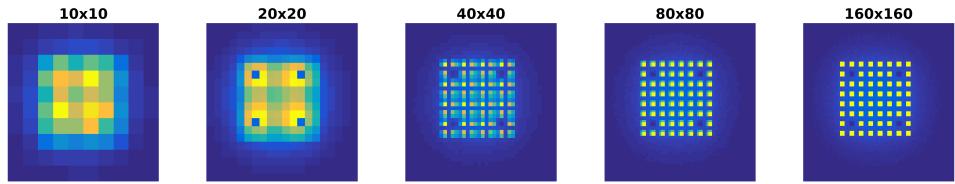
#### 12.4.5. Adjungált és $\Sigma_Z$ felbontása

Két fontos nyitott kérdés maradt még, az első, hogy az adjungált függvényt milyen pontossággal kell ismernünk, ahhoz, hogy javítani tudjon a módszer a szórásban, a másik pedig, hogy a  $\Sigma_Z$  értékeket milyen térbeli felbontással kell meghatároznunk.

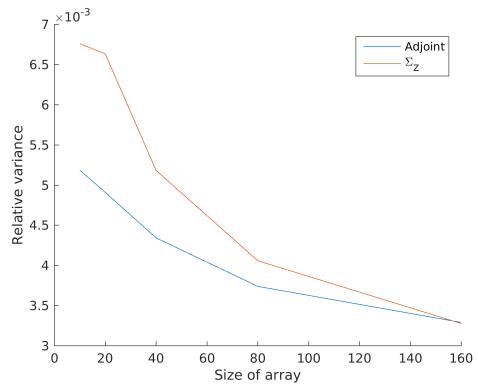
A 29. ábrán látható, hogyan változik a relatív szórás, ha a  $\Sigma_Z$  és az adjungált térbeli felbontását növeljük.

#### 12.4.6. $\Sigma_{Samp}$ választása

A  $\Sigma_{Samp}$  mintavételező hatáskeresztmetszet értékét úgy kell megválasztani, hogy nagyobb legyen a lokális  $\Sigma_t$  és  $\Sigma_Z$  értékeknél. A 30. ábrán láthatjuk a

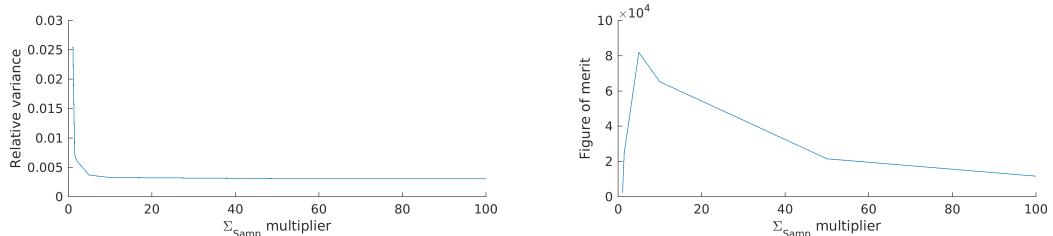


28. ábra. Az adjungált különböző térbeli felbontással meghatározva.

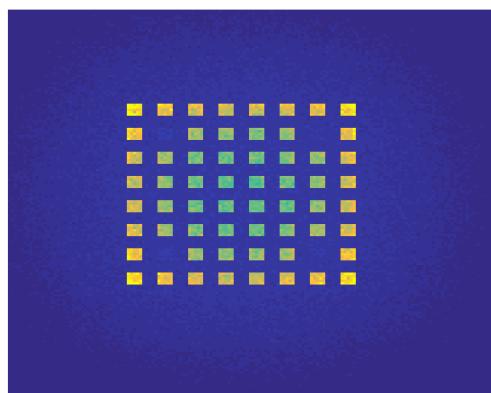


29. ábra. Relatív szórás változása az adjungált és a  $\Sigma_Z$  térbeli felbontásának függvényében.

relatív szórás és a FoM értékek változását annak függvényében, hogy a  $\Sigma_Z$  hányszorosának választottuk a  $\Sigma_{Samp}$  értékét.



30. ábra. A relatív szórás és a FoM értékek a  $\Sigma_{Samp}$  szorzójának függvényében.



31. ábra.  $\Gamma_1$  esetén irányfüggetlenül számolt  $\Sigma_Z$

## 12.5. Raytracing alkalmazása a Guardyanben

Ahhoz, hogy Guardyan-ben is kipróbálhassuk a raytracing technikát két problémával kell még megküzdenünk az előző modellhez képest, egyrészt a voxelek inhomogének lesznek és mindegyikre, minden energiára meg kell határoznunk a majoráns hatáskeresztmetszetet. Másrészt figyelembe kell vennünk, hogy a hatáskeresztmetszetek energiafüggőek.

### 12.5.1. Voxelek anyagának meghatározása

A feladatunk, hogy minden voxelben megtaláljuk az ott előforduló összes anyagot, ehhez véletlen mintapontokat veszünk az adott voxelből, és regisztráljuk az ott található anyagot. (Ez egy közelítő eljárás, előfordulhat, hogy nem találunk meg minden anyagot, de ha megengedünk negatív súlyokat is, akkor ez egzakt megoldása a problémának.) Meghatározzuk a megadott energiarácsban a majoráns hatáskeresztmetszeteket.

### 12.5.2. Majoráns számolás energiacsoportokra

A teljes energiarácsot felosztjuk  $N$  darab energiacsoportra, az osztásokat logaritmikus skálán készítjük letargia alapján:

$$u = \ln \left( \frac{E_0}{E} \right) \quad (144)$$

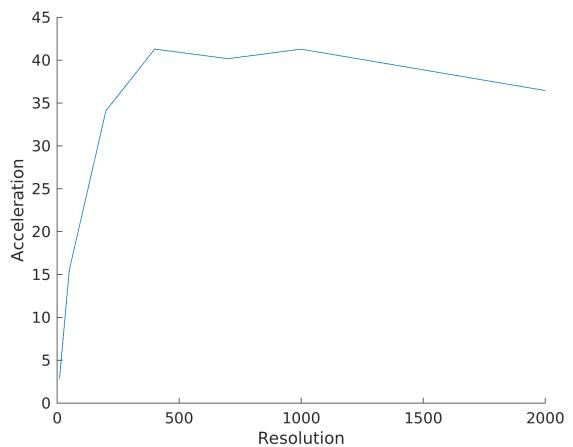
ahol  $E_0$  a teljes energiarács maximuma. Az így kapott csoportokban keressük meg minden anyagra a legnagyobb hatáskeresztmetszetet.

### 12.5.3. Futási idők összehasonlítása

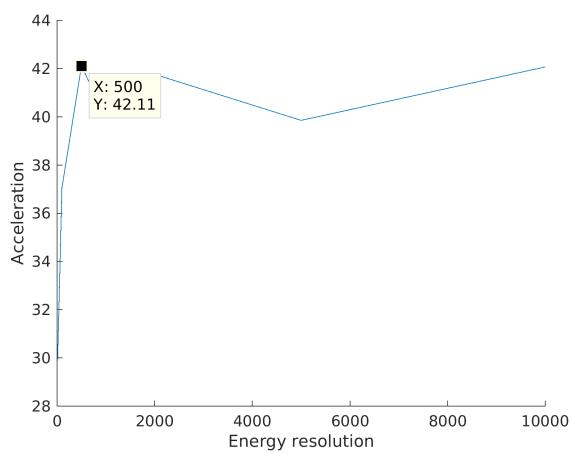
A BME oktatóreaktor geometriáján teszteltük az algoritmust homogén forráseloszlásból  $0.1 \text{ MeV}$  energiával indulva tíz  $10^{-4} \text{ s}$  időlépésekben. A 32. ábra a raytracing rács  $x$ - $y$  irányú felbontásának függvényében mutatja a kernelek átlagos gyorsulást,  $z$  irányban 32 osztást használtunk, az energiarácsot pedig ezer energiacsoportra osztottuk.

A felbontás növelésével meredeken nő a gyorsulás, majd elérve a maximumot lassan csökken, ennek oka, hogy egyre többször kell számolni a rács határaitól vett távolságot és ez erőforrásigényes.

A 33. ábra mutatja, hogy az energiacsoportok számának függvényében hogyan alakul a gyorsulás, ez alapján érdemes legalább ötszáz csoportot választani.



32. ábra. Gyorsítás a x-y irányú felbontás függvényében.



33. ábra. Gyorsítás az energiacsoportok számának függvényében.

## 13. ICSBEP

International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project

2. táblázat: ICSBEP feladatok összehasonlítása az MCNP-vel

benchmark	program	$k_d$	$\sigma_r$	$k_{eff}$	$\sigma_r$	$t(s)$
heu-met-fast-001	MCNP6	—	—	0.99981	5e-5	602
	GUARDYAN	1.00007	2.3e-4	0.99981	9e-5	31
pu-met-fast-002	MCNP6	—	—	1.00010	5e-5	555
	GUARDYAN	1.00004	7.7e-5	1.00006	1e-4	24
heu-comp-inter-003	MCNP6	—	—	1.00792	6e-5	1993
	GUARDYAN	1.00149	9.9e-5	1.00809	7e-5	427
u233-sol-inter-001	MCNP6	—	—	0.98543	8e-5	1426
	GUARDYAN	0.99971	5.8e-4	0.98506	9e-5	237
u233-sol-therm-001	MCNP6	—	—	1.00119	4e-5	7665
	GUARDYAN	1.00010	1.3e-4	1.00068	6e-5	1528
leu-sol-therm-001	MCNP6	—	—	1.01180	6e-5	2938
	GUARDYAN	1.00462	6.1e-5	1.01103	6e-5	623
leu-sol-therm-002	MCNP6	—	—	0.99983	4e-5	6455
	GUARDYAN	1.00005	3.0e-4	0.99954	5e-5	3881
leu-comp-therm-008	MCNP6	—	—	0.99972	5e-5	6311
	GUARDYAN	1.00001	3.1e-4	0.99945	6e-5	1085

Guardyan: neutron: 2097152, inactive: 20, active: 80

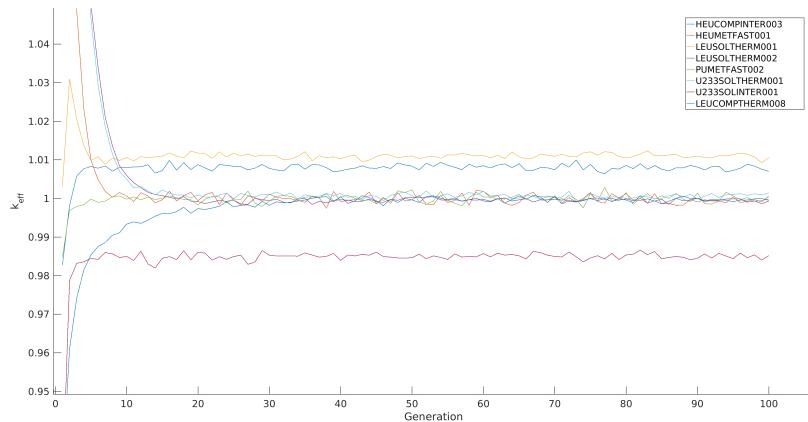
MCNP: neutron: 16384 inactive: 2560 active: 10240

CPU (12 threads): Intel Xeon CPU E5-1650 v4 @ 3.60GHz

GPU: GeForce GTX 1080

- heu-met-fast-001: bare, highly enriched uranium sphere (GODIVA)
- pu-met-fast-002:  $^{240}Pu$  JEZEBEL: bare sphere of plutonium-239 metal
- heu-comp-inter-003: reflected uranium-hydride cylindrical assemblies, case 1
- u233-sol-inter-001: uranyl-fluoride ( $^{233}U$ ) solutions in spherical stainless steel vessels with reflectors of  $Be$ ,  $CH_2$  and  $Be - CH_2$  composites - part I
- u233-sol-therm-001: unreflected spheres of  $^{233}U$  nitrate solutions
- leu-sol-therm-001: unreflected  $UO_2F_2 + H_2O$  cylindrical assembly SHEBA-II

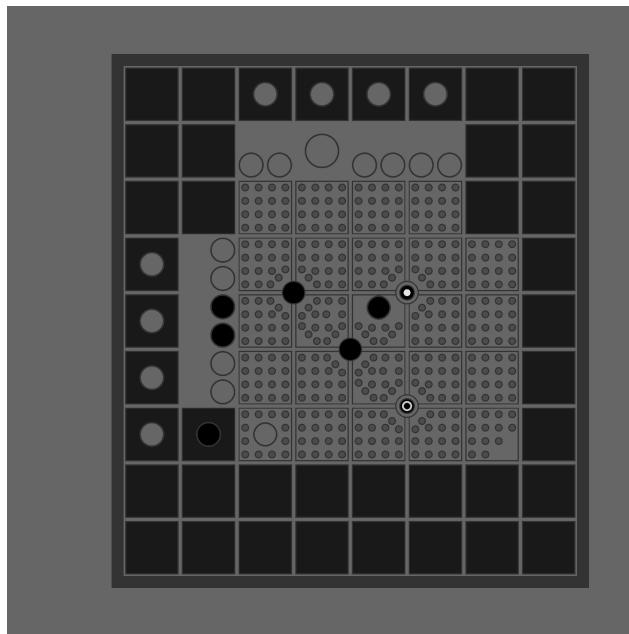
- leu-sol-therm-002: 174-liter spheres of low enriched (4.9%) uranium oxyfluoride solutions
- leu-comp-therm-008: critical lattices of  $UO_2$  fuel rods and perturbing rods in borated water, loading 8



34. ábra. A  $k_{eff}$  értékének változása a generációszámmal.

## 14. BME Oktatóreaktor

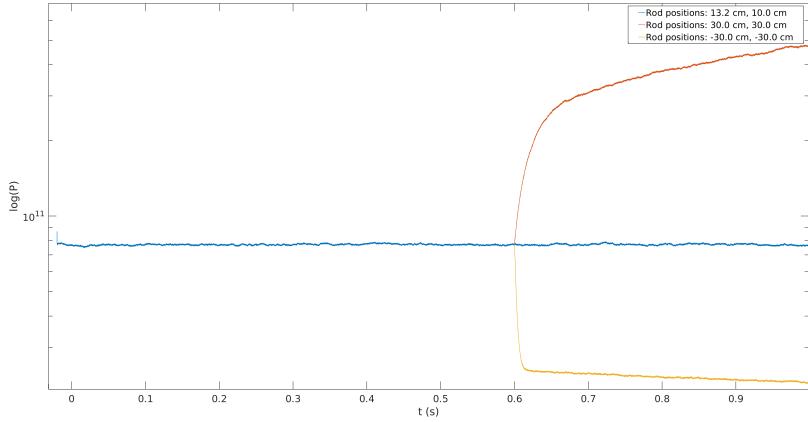
Az oktatóreaktor geometriai elrendezése látható a 35. ábrán, az egyes színek a különböző anyagokat jelölnek. Az elrendezésben 11 anyag, 56 izotóp, 114 felület, 140 cella, 13 rács, 35 univerzum szerepel, a szükséges GPU memória:  $201MB$ .



35. ábra. BME oktatóreaktor anyageloszlás egy szeleti képe.

### 14.1. Rúdejtés és rúdfelhúzás szimuláció

Egyenletes térbeli eloszlással  $0.02s$  forráskonvergencia után hozzákeverve a kés neutronokat további  $0.6s$ -ig szimulálunk, majd kiírjuk a neutronpopulációt. Ezután három különböző esetet vizsgáltunk: (1) hagytuk tovább a kritikus állapotban a rendszert (2) szuperkritikus állapotba hozzuk a szabályozó rudak  $30.0cm$ -re pozícióba helyezésével, (3) szubkritikus állapotba hozzuk a szabályozórudak  $-30cm$ -re helyezésével. Az így kialakult teljesítménymenet látható a 36. ábrán logaritmikus skálán.



36. ábra. Teljesítmény változása a szabályozórudak pozíciójának változtatásával.

## 14.2. Pálcánkénti teljesítmény

### 14.3. Kadmium-gyűrűs mérés

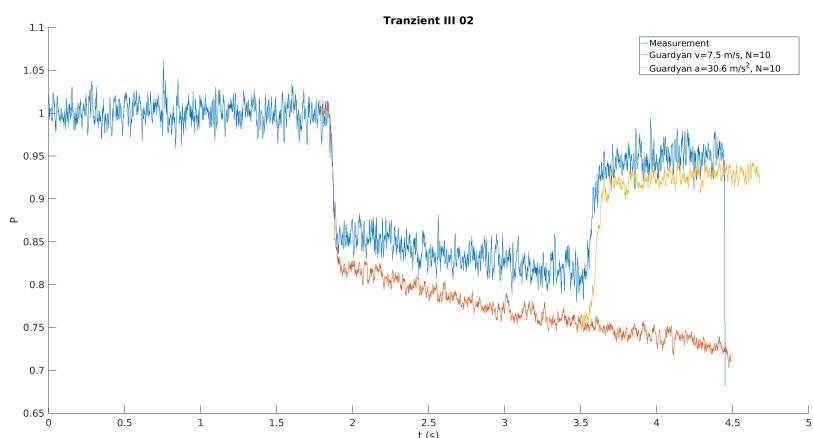
A kadmium gyűrű behelyezése előtt a reaktor néhány percig kritikus állapotban üzemelt, így a tranziens megfigyelését kritikus állapotból kezdhetük. Ahhoz, hogy a termikus visszacsatolást elhanyagoljuk a reaktor kis teljesítményen üzemelt (500W). A teljesítmény meghatározáshoz figyelembe vettük továbbá, hogy a *ms*-os lépésekben megfelelő statisztikájú mért adatokat kapjunk. A tranzienst néhány másodpercig vizsgáltuk a minta belövése után, majd kihoztuk a mintát a csőpostából.

Kadmium-gyűrű a csőpostában,  $Cd$  5 minta adatai: minta magassága 40 mm, minta átmérője 9 mm, falvastagsága 0.5 mm, tömege 4.322 g → sűrűsége  $8.0913 \frac{g}{cm^3}$ .

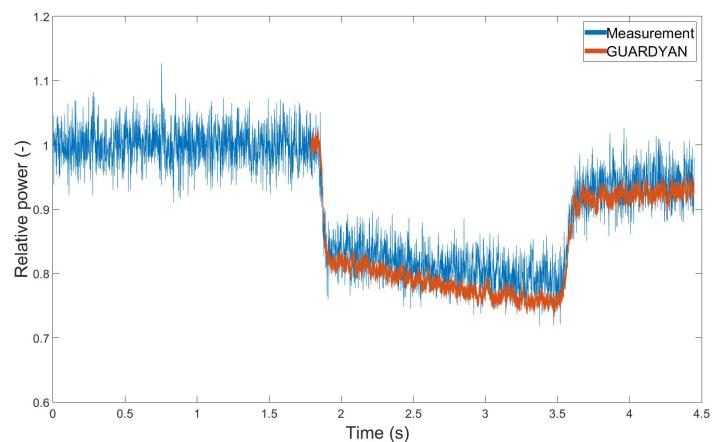
A mérés megfelelő szimulációjához a belövés során a kadmium gyűrű sebességét egyenletesnek feltételeztük ( $v = 7.5 \frac{m}{s}$ ), kihozás esetén egyenletes gyorsulású volt a modellünk ( $a = 30.6 \frac{m}{s^2}$ ), minden esetben a mintát tíz lépéssben mozgattuk a csőpostában. Ábrán holtidő korrekció nélküli eredmények láthatóak.

3. táblázat: .

1	befele	befele	kifele	kifele
1	idő (ms)	pozíció (mm)	idő (ms)	pozíció (mm)
1	104	300	1774	0
2	108	270	1788	3
3	112	240	1802	12
4	116	210	1816	27
5	120	180	1830	48
6	124	150	1844	75
7	128	120	1858	108
8	132	90	1872	147
9	136	60	1886	192
10	140	30	1900	243



37. ábra. Kadmium gyűrű belövése és kihozása a csőpostából holtidő korrekció nélkül.

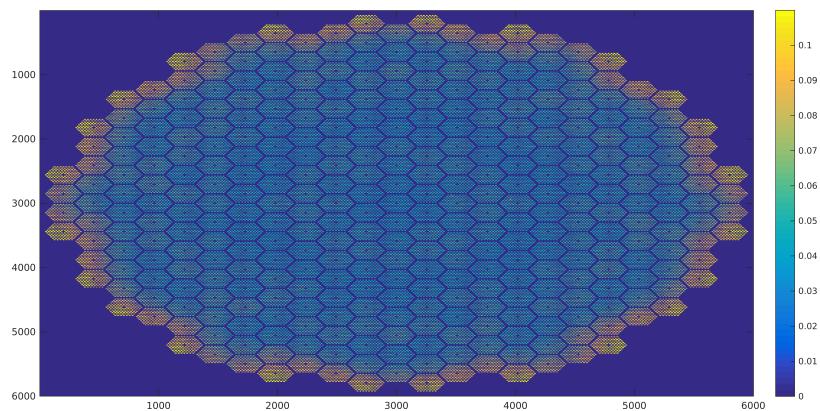


38. ábra. 150ns holtidő korrekció után.

## 15. VVER-440

surfaces 625  
cells 1528  
lattices 15  
universes 75  
transformations 1197  
materials 109  
isotopes 162

Required GPU memory for Geometry = 2125.86 MB



39. ábra. Leadott teljesítmény szórása a középső pálcahuszadban 5ms alatt.

## 16. Felhasznált fizikai állandók

Az értékek az ENDF-6 Formats Manual H.3 fejezetéből származnak:

4. táblázat: konstansok

Konstans neve	Értéke
Neutron tömeg	$1.674927471 \cdot 10^{-27} kg.$
Euler-féle szám	2.71828182852
PI(Archimedes-szám)	3.14159265359
Elemi töltés	$1.602176462 \cdot 10^{-19} C$
Finomszerkezeti állandó reciproka	137.03599976
Atomi tömegegység	$931.494013 \cdot 10^6 \frac{eV}{c^2}$
Planck-állandó	$4.13566727 \cdot 10^{-15} eV \cdot s$
Planck-állandó/2pi	$6.58211889 \cdot 10^{-16} eV \cdot s$
Boltzmann konstans	$8.617342 \cdot 10^{-5} \frac{eV}{K}$
Fénysebesség vákuumban	$299792458.0 \frac{m}{s}$
Avogadro szám	$6.02214199 \cdot 10^{23} \frac{1}{mol}$

## 17. Felhasznált mintavételezési sémák [10]

### R28

$$B(v) = \frac{v^{m-1}(1-v)^{n-1}}{B(m,n)}; (0,1), \quad (145)$$

$$b(z) = \frac{z^{m-1}}{(1+z)^{m+n}} B(m,n); (0,1), \quad (146)$$

$$q(\Theta) = \frac{2 \sin^{2m-1}(\Theta) \cos^{2n-1}(\Theta)}{B(m,n)}; (0, \pi/2), \quad (147)$$

$m, n$  not both in the set  $\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$

Sample  $\frac{x^{m-1}e^{-x}}{\Gamma(m)}$  and  $\frac{y^{n-1}e^{-y}}{\Gamma(n)}$  for  $x, y$  on  $(0, \inf)$  by C45, C64 or R27. Set  $v = \frac{x}{x+y}$ ,  $z = \frac{x}{y}$ ,  $\Theta = \arcsin(v^{\frac{1}{2}})$

### C39

$$p(\Theta) = \frac{\cosh(\Theta)}{S}; (0, t), S = \sinh(t). \quad (148)$$

Define  $A_1 = \frac{e^t - 1}{2S}$ . If  $r_0 \leq A_1$ , set  $\Theta = \ln(1 + r_1(e^t -))$ . Otherwise set  $\Theta = \ln(1 - r_1(1 - e^{-t}))$ .

R2?? Set  $\Theta = \ln(Sr_0 + \sqrt{(Sr_0)^2 + 1})$

### C40

$$p(\Theta) = \frac{\sinh(\Theta)}{C}; (0, t), C = \cosh(t) - 1. \quad (149)$$

Set  $\Theta = \ln(Cr_0 + 1 + \sqrt{(Cr_0 + 1)^2 - 1})$

### C45

$$q(u) = \frac{u^{n-1}e^{-u}}{\Gamma(n)}; (0, \inf), n \in 1, 2, 3, \dots \quad (150)$$

Set  $u = 2n \prod_1^n r_i$

### C49

$$p(\nu) = \frac{2\nu^{2n-1}e^{-\nu^2}}{\Gamma(n)}; (0, \inf), n \in 1, 2, \dots \quad (151)$$

Set  $\nu = \sqrt{(-2n \prod_1^n r_i)}$

**C61**

$$q(u) = \frac{2u^{2n-1}e^{-u^2}}{\Gamma(n)}; (0, \inf), n \in \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \quad (152)$$

Define  $h = n - 1/2$ ,  $h \in 0, 1, 2, \dots$  i.e.,  $2n = 2h + 1$ . Sample  $\frac{2e^{-\tau^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}}$  for  $\tau$  on  $(0, \inf)$  by C51 or R10. Set  $u = [-n(r_1 \dots r_h)]^{\frac{1}{2}}$

**C65**

$$g(y) = \frac{A^n y^{A-1} 2n^{n-1} \frac{1}{y}}{\Gamma(n)}; (0, 1), A > 0 n \in \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (153)$$

Sample  $\frac{x^{n-1} e^{-x}}{\Gamma(n)}$  for  $x$  on  $(0, \inf)$  by C45 or C64. Set  $y = e^{-\frac{x}{A}}$

## Hivatkozások

- [1] <http://www.putty.org/>
- [2] <https://www.nomachine.com/DT09K00056>
- [3] <https://www.qt.io/download/>
- [4] <https://github.com/pellegre/helios>
- [5] Varga Péter: Qt strandkönyv
- [6] Dimitri van Heesch: Doxygen Manual for version 1.8.11
- [7] ENDF-6 Formats Manual: Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF/B-VII, July 2010
- [8] Jaakko Leppänen: Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code, User's Manual June 18, 2015
- [9] X-5 Monte Carlo Team. MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5. Volume I: Overview and Theory. (Revised 2/1/2008). Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, Apr. 2003.
- [10] C. J. Everett and E. D. Cashwell. A Third Monte Carlo Sampler. Tech. rep. LANL No. LA-9721-MS, March 1983.
- [11] Richard J. Doyas and Sterrett T. Perkins, "Interpolation of Tabular Secondary Neutron and Photon Energy Distributions," Nucl. Sci. Eng., 50, 390-392 (1972).
- [12] Ely M. Gelbard, "Epithermal Scattering in VIM," FRA-TM-123, Argonne National Laboratory (1979).
- [13] Leo B. Levitt, "The Probability Table Method for Treating Unresolved Neutron Resonances in Monte Carlo Calculations," Nucl. Sci. Eng., 49, pp. 450-457 (1972).
- [14] Dermett E. Cullen and Charles R. Weisbin, "Exact Doppler Broadening of Tabulated Cross Sections," Nucl. Sci. Eng., 60, pp. 199-229 (1976).
- [15] G. L. Squires, Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering, Cambridge University Press (1978).
- [16] B. E. Watt, "Energy Spectrum of Neutrons from Thermal Fission of U235," Phys. Rev., 87 (6), 1037-1041 (1952).

- [17] M. M. R. Williams, The Slowing Down and Thermalization of Neutrons, North-Holland Publishing Co., Amsterdam (1966).
- [18] <http://www.redblobgames.com/grids/hexagons/>
- [19] <https://mcnp.lanl.gov/>
- [20] <https://openmc.readthedocs.io/en/stable/>
- [21] Bart Laurens SJENITZER, The Dynamic Monte Carlo Method for Transient Analysis of Nuclear Reactors (2013)
- [22] László Szirmay-Kalos, Balázs Tóth, and Milán Magdics: Free Path Sampling in High Resolution Inhomogeneous Participating Media