

CÁLCULOS DE CRITICIDAD - PARTE I

CURSO ESFM-IPN

Arturo Delfín Loya

<https://arturodelfinloya.github.io/MCNP>

Agosto, 2016



instituto nacional de
investigaciones nucleares



Cálculos de criticidad - Parte I

- ▶ Repaso de criticidad
- ▶ Estimadores de criticidad
- ▶ Tarjetas KCODE & KSRC
- ▶ Ejemplos y archivos de salida

Cálculos de criticidad - Parte II

- ▶ Convergencia
- ▶ Graficado
- ▶ Ejemplos y gráficas
- ▶ Continuación de la corrida

Repaso de Criticidad

$$[\hat{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_T(\vec{r}, E)] \cdot \Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \int \int \Psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') \Sigma_S(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\hat{\Omega}' dE' + \frac{1}{k_{eff}} \frac{\chi(E)}{4\pi} \int \int v \Sigma_F(\vec{r}, E') \Psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') d\hat{\Omega}' dE' \quad (1)$$

$$[L + T]\Psi = S\Psi + \frac{1}{k_{eff}} M\Psi \quad (2)$$

donde: k_{eff} = **k-efectiva**, es el eigenvalor, para el modo fundamental
 $\Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ = **flujo** angular, para el k -eigenmodo fundamental

L	Operador Fuga	S	Operador Dispersión
T	Operador Colisión	M	Operador Multiplicación por fisión

Conjuntamente se busca k_{eff} y $\Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ para las ecuaciones de balance

- Ecuaciones del eigenvalor- k

$$[L + T]\Psi = S\Psi + \frac{1}{k_{eff}}M\Psi \quad (3)$$

- Esta es una ecuación **estática**, un **problema de valor propio** para k_{eff} y Ψ sin dependencia del tiempo
- k_{eff} se denomina **factor de multiplicación efectiva**

Supercrítico	$k_{eff} > 1$
Crítico	$k_{eff} = 1$
Subcrítico	$k_{eff} < 1$

- Nunca use k_{eff} y Ψ para modelar problemas con dependencia del tiempo
- Problemas k_{eff} -eigenvalor pueden ser resueltos por Monte Carlo

⇒ Esta ecuación de eigenvalor puede resolverse por iteración de potencias

$$[L + T - S]\Psi = \frac{1}{k_{eff}} M\Psi \quad (4)$$

$$\Psi = \frac{1}{k_{eff}} [L + T - S]^{-1} M\Psi \quad (5)$$

$$\Psi = \frac{1}{k_{eff}} F\Psi \quad (6)$$

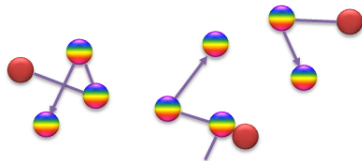
$$\Psi^{(n+1)} = \frac{1}{k_{eff}^{(n)}} F\Psi^{(n)} \quad (7)$$

Procedimiento de iteración de potencias

1. Estimación inicial para k_{eff} y Ψ
 $k_{eff}^{(0)}$, $\Psi^{(0)}$
2. Resolver para $\Psi^{(0)}$ [Monte Carlo, realiza trayectoria aleatoria para N partículas]



Puntos de origen para $\Psi^{(0)}$



Puntos de origen para $\Psi^{(n+1)}$

3. Calcular la nueva k_{eff}

$$k_{eff}^{(n+1)} = k_{eff}^{(n)} \frac{\int M\Psi^{(n+1)} d\vec{r}}{\int M\Psi^{(n)} d\vec{r}} \quad (8)$$

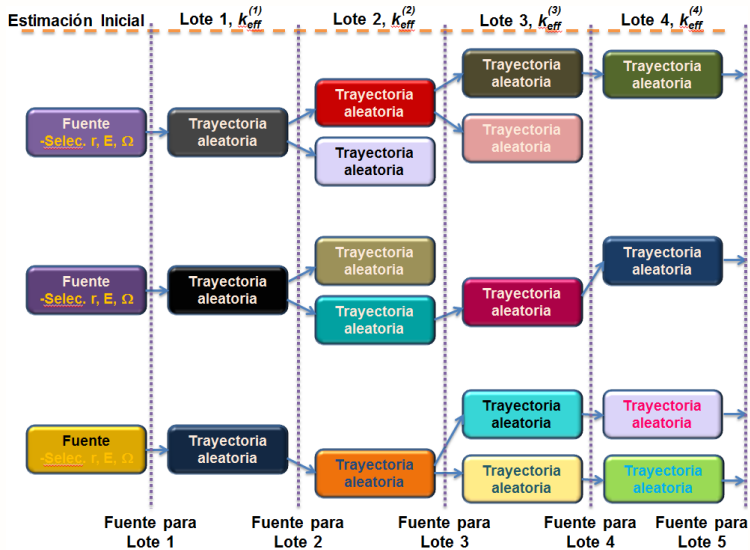
4. Repetir los pasos 1-3 hasta que ambos $k_{eff}^{(n+1)}$ y $\Psi^{(n+1)}$ hayan convergido

$$\Psi^{(n+1)} = \frac{1}{k_{eff}^{(n)}} F\Psi^{(n)} \quad (9)$$

Iteración de Potencias (3)

P-03 Básico MCNP

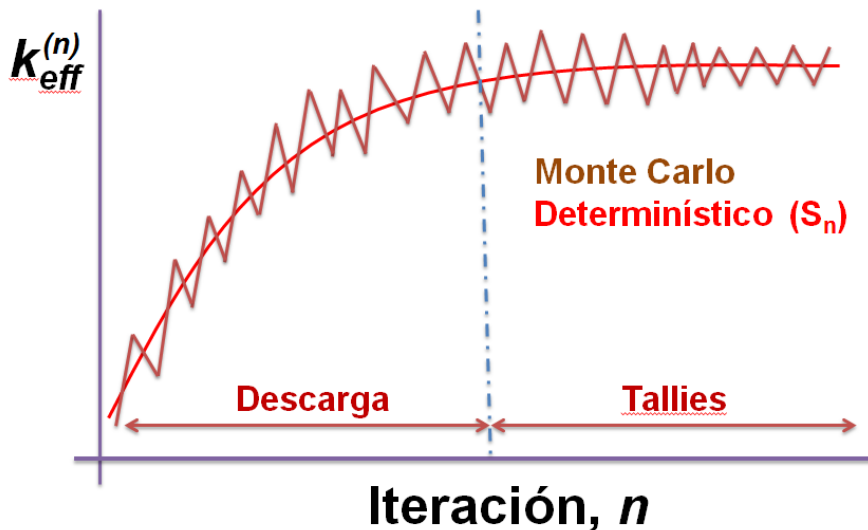
8/30



Iteración de Potencias (4)

P-03 Básico MCNP

9/30



- ▶ Una estimación inicial de la distribución de la fuente
- ▶ Realiza iteraciones hasta que converge (cómo hace esto?)
- ▶ Entonces:
 - Para el código S_n : hace, imprime resultados
 - Para Monte Carlo: Inicia los Tallies,
sigue corriendo hasta que las incertidumbres son lo suficientemente pequeñas
- ▶ ¿Convergencia? Estacionario? ¿Tendencia? ¿Estadística?

- ▶ Las historias se ejecutan en lotes de N partículas
- ▶ **Distribución espacial:**
 - La distribución inicial de la posición de la fuente de fisión vienen de la tarjeta KSRC, SDEF, o SRCTP
 - Después de primer lote, la posición de la fuente son tomadas de lote anterior
- ▶ El peso total de cada lote es N
- ▶ Para cada lote, 3 estimaciones de K_{eff} se hacen para cada uno
 - Estimación de k_{eff} por la longitud de la trayectoria (track-length)
 - Estimación de k_{eff} por colisiones
 - Estimación de k_{eff} por absorciones

- ▶ Se desechan los D lotes iniciales (los **inactivos**, donde la fuente puede ser convergente), acumula resultados totales para lotes activos $D+1...M$
- ▶ Al final del problema, las estimaciones de los lotes desde los lotes **activos** son combinados en 7 estimaciones totales (solo los últimos en cuestión)
 - 3 estimaciones del k_{eff} acumulativos usando longitud de trayectoria, colisión y absorción
 - 3 estimaciones del k_{eff} acumulativos usando pares
 - 1 Estimación de la combinación acumulada de todo, basada en todos los datos

Lote = Ciclo = Iteración = Generación

Estimadores de k -efectiva

► **Estimador de longitud de trayectoria para el flujo**

- Flujo \equiv longitud de trayectoria de viaje realizado por todos los neutrones por unidad de volumen por unidad de tiempo
- Para el flujo total en una celda

$$\phi = \frac{1}{W.V} \sum_{tt} d_k.wgt \quad (10)$$

tt = todas las trayectorias en la celda, V = volumen de la celda,
 W = peso total inicial

► **Estimador de colisión para el flujo**

- Rapidez de colisión = $\Sigma_T \phi$ con $\phi = [\text{rapidez de colisión}]/\Sigma_t$
- Para el flujo en una celda

$$\phi = \frac{1}{W.V} \sum_{tc} \frac{wgt}{\Sigma_T} \quad (11)$$

tc = todas las colisiones en la celda

► **Estimador de absorción para el flujo**

- Rapidez de absorción = $\Sigma_A \phi$ con $\phi = [\text{rapidez de colisión}]/\Sigma_A$
- Para el flujo en una celda, $ta = \text{todas las absorciones en la celda}$

$$\phi = \frac{1}{W.V} \sum_{ta} \frac{wgt}{\Sigma_A} \quad (12)$$

Estimadores de k_{eff} para un ciclo

Rapidez de producción de neutrones = $\nu \Sigma_F \phi$

► Estimador de longitud de trayectoria para k_{eff} en el ciclo n

$$k_{tray}^{(n)} = \left[\sum_{tt} wgt_j \cdot d_j \cdot \nu \Sigma_F \right] / W \quad (13)$$

W = Peso total inicial del ciclo n

tt = todas las trayectorias

- Estimador de colisión para k_{eff} en el ciclo n

$$k_{col}^{(n)} = \left[\sum_{tc} \frac{wgt_j \cdot \nu \Sigma_F}{\Sigma_T} \right] / W \quad (14)$$

W = Peso total inicial del ciclo n

tc = todas las colisiones

- Estimador de absorción para k_{eff} en el ciclo n

$$k_{abs}^{(n)} = \left[\sum_{ta} \frac{wgt_j \cdot \nu \Sigma_F}{\Sigma_A} \right] / W \quad (15)$$

W = Peso total inicial del ciclo n

ta = todas las absorciones

Estimadores Simples

k_{tray} promedio sobre todos los ciclos activos de $k_{tray}^{(n)}$

k_{col} promedio sobre todos los ciclos activos de $k_{col}^{(n)}$

k_{abs} promedio sobre todos los ciclos activos de $k_{abs}^{(n)}$

Estimadores Dobles (incluyendo correlación)

k_{p-c} promedio combinado sobre todos los ciclos de $k_{tray}^{(n)}$ y $k_{col}^{(n)}$

k_{p-a} promedio combinado sobre todos los ciclos de $k_{tray}^{(n)}$ y $k_{abs}^{(n)}$

k_{c-a} promedio combinado sobre todos los ciclos de $k_{col}^{(n)}$ y $k_{abs}^{(n)}$

Estimador Total Combinado [el mejor, únicamente para reporte] (incluyendo correlación)

k_{p-c-a} promedio combinado sobre todos los ciclos activos de $k_{tray}^{(n)}$, $k_{col}^{(n)}$ y $k_{abs}^{(n)}$

- ▶ **Intervalo de confianza**

- Rango que contiene el valor verdadero de k_{eff} con una probabilidad especificada

- ▶ **Intervalo de confianza del 68%**

- $k_{eff} - \sigma \leq k_{verdadero} \leq k_{eff} + \sigma$

- ▶ **Intervalo de confianza del 95%**

- $k_{eff} - 2\sigma \leq k_{verdadero} \leq k_{eff} + 2\sigma$

- ▶ **Intervalo de confianza del 99%**

- $k_{eff} - 2,6\sigma \leq k_{verdadero} \leq k_{eff} + 2,6\sigma$

- ▶ **Para obtener mejores intervalos de confianza (pequeñas σ)
Correr más historia (más ciclos) $\sigma \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$**

Tarjetas KCODE y KSRC

► Cálculos de control para k_{eff}

Tarjeta KCODE

- Número de partículas por ciclo
- Suposición inicial para k_{eff}
- Número de ciclos iniciales de omisión
- Número total de ciclos que debe correr

► Suposición para inicio de la fuente

Tarjeta KSRC

- Puede especificar un valor para los puntos x, y, z , para la localización inicial de los neutrones de fisión

Archivo SRCTP

- Puede emplear un archivo con localizaciones de las fuentes de un cálculo previo

Tarjeta SDEF

- Puede especificar puntos de la fuente que deben ser tomadas desde un volumen (p.e. esfera, cilindro, caja, etc.)

KCODE	N	k_{est}	$ndescargas$	$ntotal$
	N	= número de partículas por ciclo		
		Típicamente: 1K - 2K para prueba		
		5K - 100K para producción		
	k_{est}	= Suposición inicial para k_{eff} usualmente 1.0		
	$ndescargas$	= Número de ciclos inactivos para descargar antes de que comiencen los tallies		
	$ntotal$	= Número total de ciclos a correr deben ser $> ndescargas + 100$		

(Ver manual para entradas opcionales)

Puede especificar los puntos de localización de la fuente con KSRC o SDEF (no ambos)

ksrc 0 0 0 .5 .5 .25 .1 .1 .1 [etc] \$ puntos discretos

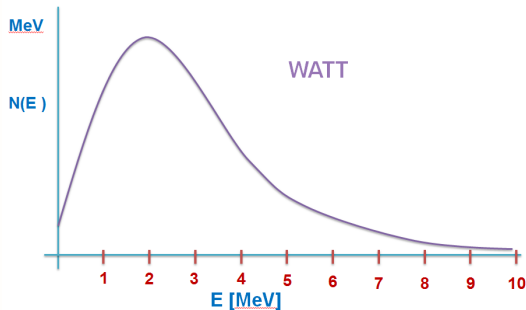
Para KSRC, los puntos de la fuente son reutilizados como sea necesario para obtener a partir ubicaciones, todas las partículas en el ciclo inicial

sdef	$x = d1$	$y = d2$	$z = d3$	
si1	-5.	5.		\$ uniforme en una caja
sp1	0	1		\$ medida en x (-5, 5)
si2	15.	75.		\$ uniforme en x
sp2	0	1		\$ medida en y (15, 75)
si3	0.	100.		\$ uniforme en y
sp3	0	1		\$ medida en z (0, 100)
				\$ uniforme en z

Sólo para el ciclo inicial, la energía de neutrones se toman muestras a partir del espectro de fisión Watt. (Otros ciclos usan datos actuales de (n, f) y distribuciones de energía)

$$p(E) = C e^{-\frac{E}{a}} \sinh \sqrt{bE} \quad (16)$$

$$a = 0.965 \text{ MeV}, \quad b = 2.29 \text{ MeV}^{-1}$$



Números aleatorios

- MCNP es un código de Monte Carlo & usa números aleatorios para tomar muestras de la densidades de probabilidad
- Si un cálculo se repite usando la misma entrada & biblioteca de secciones eficaces, parte por parte se obtienen resultados idénticos

Cómo se puede repetir los cálculos empleando diferentes números aleatorios?

Coloque esta tarjeta

rand **gen=k** **seed=n**

gen=k - Escoja el generador de número aleatorio

gen=1 - El generador predeterminado de 48 bits, tiene periodo de 10^{14}

gen=2, 3, 4 - Para generadores de 64 bits, el periodo es de 10^{18}

seed=n - Establece la semilla aleatoria inicial = n

n - Debe ser un entero impar, 18 dígitos o menos

- ▶ Para el ejercicio, **ipn3** cambie la semilla aleatoria, salve como **ipn3a** vuelva a ejecutar el problema, compare las respuestas
- ▶ Los resultados deben ser diferentes, pero deben concordar en las estadísticas
- ▶ Si los cálculos se realizaron utilizando diferentes semillas aleatorias, los resultados son estadísticamente independientes y se pueden promediar juntos. (usando pesos proporcionales a $\frac{1}{\sigma^2}$)

```

ipn3 - Cilindro simple
10 100 9.9270e-2 -10 -30 imp:n=1 $ Solucion
20 0 -10 +30 imp:n=1 $ Vacio arriba-solucion
30 200 8.6360e-2 10 -20 imp:n=1 $ Lata
40 0 20 imp:n=0 $ Exterior vacío

10 RCC 0. 0. 0. 0. 0. 101.7 12.49 $ Interior de la lata
20 RCC 0. 0. -1. 0. 0. 103.7 12.79 $ Exterior de la lata
30 pz 39.24 $ Altura de la solucion

kcode 1000 1.0 25 100 $ Calculo de criticidad
ksrc 0.0 0.0 19.62 $ Posicion de la fuente
m100 . . . . . $ Material de la solucion Pu(N03)3
. . . . .
mt100 lwtr
m200 . . . . . $ Material de la lata
. . . . .
rand seed=123456789
    
```

- ▶ Ejecute nuevamente el problema, ipn3 con la semilla original de default RN
 - Debe conseguir mismo resultado que antes (o muy aproximado): "keff = 0.87804 with an estimated standard deviation of 0.00377"
- ¿Por qué?
- ▶ Examine el archivo de salida para el cálculo de KCODE
 - Archivo de entrada
 - Volúmenes y masas
 - Información del número aleatorio
 - Información de las secciones eficaces
 - Información del ciclo
 - * Ciclos inactivos un solo ciclo k 's
 - * Ciclos activos un solo ciclo k 's y ciclos acumulativos
 - Tabla de resultado global de las partículas

► - Información de KCODE

- * Pruebas
- * "La caja" Resumen de los resultados finales, en general
- * Información de resúmenes, "qué pasaría si"
- * Información de procesamiento por lotes y estadística
- * Más tablas y resúmenes de todo ...
- * Impresión de tablas (uf!) de k_{eff} vs ciclo, con las estadísticas
- * Tabla - Qué si es diferente en el número de ciclos descargados ...
- * Impresión de tablas de k_{eff} vs ciclos descargados

- ▶ Añadir esta tarjeta en la sección de la tarjeta de datos de: **ipn3a**
print
- ▶ Corra nuevamente el problema **ipn3a**
 - Debe conseguir mismo resultado que antes (o muy aproximado): " $k_{eff} = 0.87804$ with an estimated standard deviation of 0.00377"
 - ¿Por qué?
- ▶ Examine el archivo de salida para el cálculo de KCODE
 - Más información se imprime, además de lo que ya encontramos
 - Información de la fuente (origen)
 - Información de las celdas
 - Información de las superficies
 - Constantes del código
 - * Note que el número de Avogadro se imprime como $6.02204...E+23$
 - * Cuando debe ser $6.02214...E+23$

- ▶ - Los valores Q de fisión (Nota: sólo energía pronta !!!)
 - Primeros 50 puntos de la fuente
 - Balance y resumen información por celda y núclido
 - Información de más lotes
- ▶ Para el problema **ipn3a**, cambiar el número de neutrones/ciclo de la tarjeta KCODE a 5000
- ▶ Corra el problema y compare resultados
- ▶ Los resultados pueden ser diferentes, pero deben concordar en las estadísticas
- ▶ Fluctuaciones y k_{eff} final debe contar con estadísticas más pequeñas

$$\sigma \propto \frac{1}{\sqrt{N}} \propto \frac{1}{\sqrt{(\#ciclos) \frac{\#neutrones}{ciclo}}} \quad (17)$$

Estado	Tarjeta	Parámetros	k_{eff} y σ
Previo	kcode	1000 1.0 25 100	$k_{eff} = 0.88385 \pm 0.00367$
Corriendo	kcode	5000 1.0 25 100	$k_{eff} = 0.87816 \pm 0.00173$
Más	kcode	10000 1.0 25 100	$k_{eff} = 0.88158 \pm 0.00118$
	kcode	20000 1.0 25 100	$k_{eff} = 0.88057 \pm 0.00083$
	kcode	50000 1.0 25 250	$k_{eff} = 0.88133 \pm 0.00032$
	kcode	100000 1.0 25 250	$k_{eff} = 0.88???? \pm 0.0002???$

Correr el mismo problema hasta escalarlo en:

kcode 1000000 1.0 75 750