

REPASO DE INGENIERÍA NUCLEAR Y MONTE CARLO

CURSO ESFM-IPN

Arturo Delfín Loya

<https://github.com/arturodelfin/MCNP-Lectures>

Agosto, 2016



instituto nacional de
investigaciones nucleares



Revisión Básica de Ingeniería Nuclear

- ▶ Flujo
- ▶ Secciones eficaces
- ▶ Rapidez de reacción

Introducción a Monte Carlo

- ▶ Suposiciones
- ▶ Simulación
- ▶ Tallies

Revisión de Estadística

- ▶ Densidad de probabilidad (PDF)
- ▶ Densidad acumulativa (CDF)
- ▶ Estadística

Flujo

$$\Phi = nv$$

n = densidad de partículas

$part/cm^3$

función de posición

v = velocidad de la partícula

cm/seg

Φ = flujo escalar

$part/cm^2 - seg$

función de la posición y energía
(pero no de la dirección)

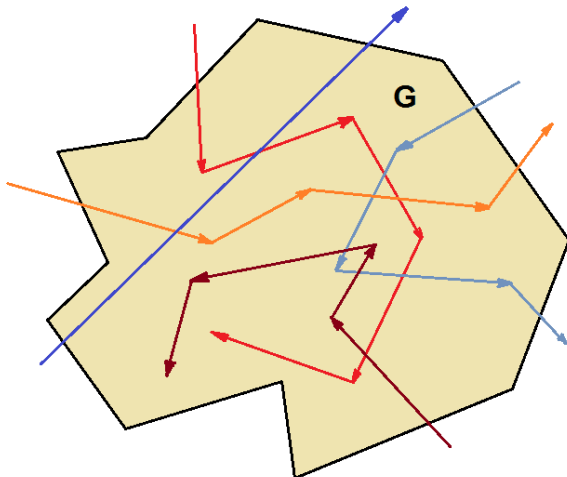
mayoría de los textos

El flujo escalar es la distancia total recorrida por todas las partículas, por cm^3 por seg .

Experimentalmente

- ▶ Supongamos que vemos el viaje de todas las partículas alrededor y sus colisiones.
- ▶ Registramos todas las porciones de sus distancias del viaje por seg de cada una dentro de una región **G**.
- ▶ La distancia total recorrida dividida por el volumen y 1 segundo es el flujo de escalar en la región.

Esta es la forma MC estima el flujo en una región. Esta es la base para la "determinación de longitud de trayectoria"



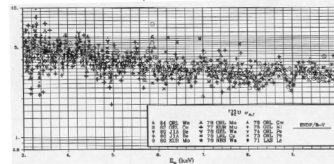
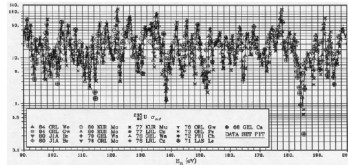
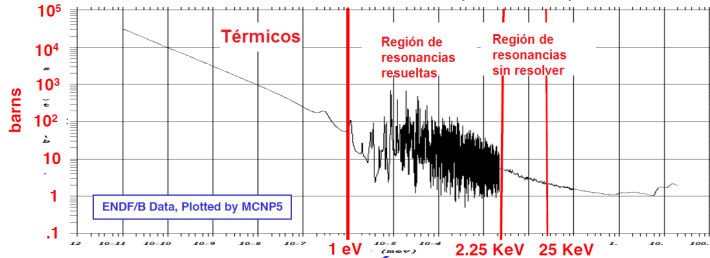
Sección Eficaz Microscópica

- ▶ σ = área del blanco de un solo nuclido para una interacción.
- ▶ Unidades: barns $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$
- ▶ Ejemplos: σ_a^{235} , σ_s^H , σ_{n-2n}^{238}
- ▶ Unidades: **Datos de sección eficaz microscópica**
 - ▶ Medidas experimentales.
 - ▶ Determinadas desde la teoría (pe. mecánica cuántica)
 - ▶ Experimentos + teoría + a juicio del Cross Section Evaluation Working Group (CSEWG) para producir base de datos de ENDF

Absorción v.s. Captura

- ▶ Para IN's: $\sigma_a = \sigma_c + \sigma_f$
- ▶ $\sigma_t = \sigma_c + \sigma_f + \sigma_s = \sigma_a + \sigma_s$
- ▶ Absorción = fisión + captura
- ▶ Los físicos a menudo intercambian "captura" y "absorción"

Sección eficaz de fisión (neutrones)



Experimental Data used by CSWEG

Pensando experimentalmente

- ▶ Suponiendo que se produce una colisión con el nuclido j
- ▶ ¿cuál es la probabilidad de que la partícula entrante sobrevivir a la colisión?
- ▶ Note que: $\sigma_t^j = \sigma_a^j + \sigma_s^j$ Absorción \Rightarrow desaparece la partícula
- ▶ Dispersión \Rightarrow la partícula sobrevive
- ▶ Probabilidad de sobrevivencia = σ_s^j / σ_t^j

Dado que una colisión ocurre con el nuclido j

- ▶ ¿cuál es la probabilidad de que fisione?
- ▶ Note que: $\sigma_t^j = \sigma_f^j + \sigma_c^j + \sigma_s^j$
- ▶ Probabilidad de sobrevivencia = σ_f^j / σ_t^j

En el código MCNP, "dado que una colisión ocurre con el nuclido j , las probabilidades se basan en las relaciones parciales de las σ 's para el nuclido j , que se utilizan en el muestreo de las reacciones que se llevan a cabo con ese nuclido"

Sección Eficaz Macroscópica, Σ

- ▶ $\Sigma = N\sigma$
- ▶ La probabilidad de interacción con un material, por unidad de distancia viajada
 - ▶ N = densidad de nuclidos, átomos/barn-cm, $n_{av}\rho/A$
 - ▶ $\Sigma = [\text{nuclidos/barn-cm}] * [\text{barns/nuclido}] = 1/\text{cm}$
- ▶ Trayectoria media libre = $\lambda = 1/\Sigma$ cm

$$\Sigma_f^{U235} = N^{U235} * \sigma_f^{U235}$$

$$\Sigma_f^{comb} = N^{U235} * \sigma_f^{U235} + N^{U238} * \sigma_f^{U238} + N^{Pu239} * \sigma_f^{Pu239} + \dots$$

Sección Eficaz Macroscópica de Materiales

Se suma $N\sigma$ para cada nuclido $\Sigma_x^{mat} = \Sigma_i^{nucl.en.mat.} N^i * \sigma_x^i$
para una reacción x ($x: t, a, f, s, c, n-2n, \dots$)

$$\Sigma_f^{comb} = \Sigma_f^{U235} + \Sigma_f^{U238} + \Sigma_f^{U239} + \dots$$

$$\Sigma_f^{comb} = N^{U235} * \sigma_f^{U235} + N^{U238} * \sigma_f^{U238} + N^{Pu239} * \sigma_f^{Pu239} + \dots$$

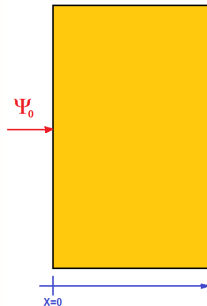
Dada que una colisión ocurra en un material

la probabilidad de este involucre al nuclido k es: $P_k^{mat} = \Sigma_t^k / \Sigma_t^{mat}$

⇒ Así es como MC selecciona un nuclido en particular,
dado que se produce una colisión en el material.

Para haces de partículas

- ▶ $\Psi(r, E, \Omega)$ = flujo angular en r , dirección Ω cantidad direccional, integrada sobre todo Ω para obtener el flujo escalar Φ
 - ▶ Si el haz de partículas es dirigida una placa infinita puramente absorbente, cuánto llega del haz a penetrar una distancia x de la placa
 $\Psi(x) = \Psi_0 * e^{-\Sigma_t x}$
 - ▶ La probabilidad de recorrer una distancia x sin colisionar es: $e^{-\Sigma_t x}$
 - ▶ La probabilidad de colisionar en una distancia x es: $\Sigma_t * e^{-\Sigma_t x}$
- ▶ [prob. de colisionar en x por unidad de distancia]*[prob de alcanzar x sin colisión]
 - ▶ El código MCNP emplea ésta relación como cálculo de distancia para la próxima colisión



En ocasiones los ingenieros nucleares, no tienen cuidado del flujo

Las cantidades importantes y útiles requeridas pueden ser:

absorción en una región, fisión en una región, calentamiento en una región,
absorción en U^{235} , U^{238} , Pu^{239} , B^{10} , Hf , Zr , ... , etc.

rapidez de reacción

- ▶ rapidez de absorción = $\Sigma_a \Phi$
- ▶ rapidez de fisión = $\Sigma_f \Phi$
- ▶ rapidez de producción de neutrones = $\nu \Sigma_f \Phi$
- ▶ rapidez de absorción en U^{235} = $\Sigma_a^{U^{235}} \Phi$

Rapidez de reacción = $[reacciones/cm] * [total\ cm\ viajados/cm^3 * seg] =$
 $reacciones/cm^3 - seg$

Para obtener las *reacciones/seg* en una región, integrar sobre el volumen de la región

Para la rapidez de reacción en un material, use la Σ del material
Para la rapidez de reacción en un nuclido, use la Σ del nuclido (en el material)

Pensando experimentalmente

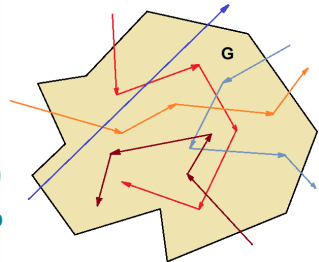
- ▶ Suponiendo que vemos a todas las partículas que viajan alrededor y tienen colisiones
- ▶ registramos todas las colisiones dentro de una región **G**, para todas las partículas, por segundo
- ▶ rapidez de colisión: $\Sigma_t \Phi$
- ▶ Solución para el flujo: $\Psi = [\text{rapidez.de.colisión}] / \Sigma_t$
- ▶ \Rightarrow MC usa esta ecuación para calcular el flujo en una región
Ésta es la base para un "cálculo de colisión"

Observamos que MC puede calcular el flujo en una región de diferentes formas

- ▶ Cálculo de trayectorias - [distancia total que viaja en una región] / (Volumen x tiempo)
- ▶ Cálculo de colisión - [colisiones totales en una región] / Σ_t
- ▶ Qué es lo correcto?: ambos
- ▶ Cuál es el mejor?: depende de la física y geometría del problema
- ▶ Hay más formas del cálculo de flujo?: Si (flujo en un punto, en una superficie, ...)
- ▶ Cuál se debe usar?: si se puede todas (estadística combinada)

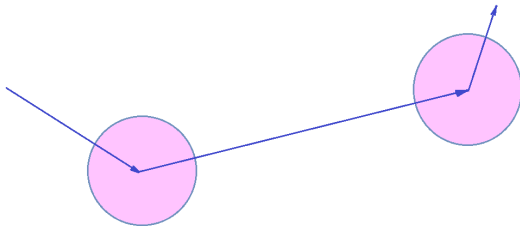
MCNP únicamente provee cálculo de trayectorias de flujo para una región

Algunos códigos de MCNP únicamente proveen cálculo de colisión, algunos proveen ambos



Naturaleza de la simulación

Las partículas se mueven a través de un objeto físico



- ▶ **Trayectoria (flight)**
- ▶ Las partículas se mueven a través de un objeto físico
- ▶ distancia de vuelo (trayectoria) libre, para la siguiente colisión s
- ▶ Los rayos se trazan en 3D, usando geometría computacional.

- ▶ **Colisión**
- ▶ **Simula absorción**
- ▶ absorbe o reduce el peso
- ▶ **Muestreo aleatorio usando datos nucleares**
- ▶ colisión con isotopos
- ▶ tipo de reacción
- ▶ salidas E' & Ω'
- ▶ partículas secundarias

Durante ambos análisis trayectoria (flight) y colisión, se tiene información de un tally sobre: distancias, colisiones, etc., que se emplean para el análisis estadístico en los resultados

- ▶ **Supone**

- ▶ que las partículas se mueven en línea recta entre colisiones (neutrones, fotones)
- ▶ las colisiones ocurren instantáneamente, en un punto en el espacio
- ▶ las velocidades de las partículas son suficientemente pequeñas, que se pueden despreciar efectos relativísticos
- ▶ las velocidades de las partículas son suficientemente grandes, que se pueden despreciar efectos cuánticos
- ▶ las colisiones de las partículas no cambian las propiedades de un material
- ▶ las propiedades del material son fijas durante la duración de la simulación (geometría, densidades, temperatura, composición de materiales,...)

- ▶ **Por qué?**

- ▶ por que se quiere resolver la ecuación lineal de transporte de Boltzmann
- ▶ por que se quiere aplicar el principio de superposición
- ▶ por que el teorema de límite central se aplica para estadística computacional Los estadísticos aman el término "IID" - Independent, Identically Distributed

La ecuación lineal de transporte de Boltzmann dependiente del tiempo para neutrones, con fuente de fisión inmediata y fuente externa

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} = & Q(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \int \int \Psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \Sigma_S(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}, \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}' dE' \\ & + \frac{\chi((\vec{r}, E, t))}{4\pi} \int \int v \Sigma_F(\vec{r}, E', t) \Psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}' dE' - [\hat{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_T(\vec{r}, E, t)] \cdot \Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \end{aligned} \quad (1)$$

Tenemos: Fuente externa, dispersión, multiplicación, fuga y colisiones

Ésta ecuación puede ser resuelta directamente por MC, suponiendo:

- ▶ Cada historia del neutrón es un proceso IID (independent, identically distributed)
- ▶ Todos los neutrones con la misma densidad de probabilidad en todo el espacio fase
- ▶ **Método usual: la geometría y materiales están fijos sobre un intervalo de solución Δt**

$$\frac{1}{V} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} = Q + [S + M] \cdot \Psi - [L + T] \cdot \Psi \quad (2)$$

Solución de MC (sobre Δt , con geometría y materiales fijos)

- ▶ Simula el transporte dependiente del tiempo, para la historia de un neutrón
- ▶ Si la fisión ocurre, trae (bank) cualquier neutrón secundario
- ▶ Cuando la partícula original finaliza, simula secundarios
- ▶ Tallies para tiempo, energía, celdas,...

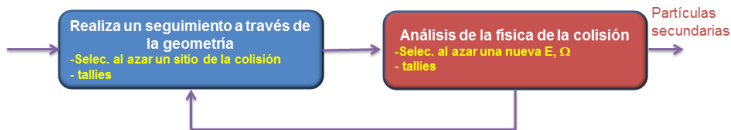
El nivel general de neutrones al tiempo t es:

$$N(t) = \int_{\vec{r}} \int_E \int_{\hat{\Omega}} \frac{\Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} d\vec{r} dE d\hat{\Omega} \quad (3)$$

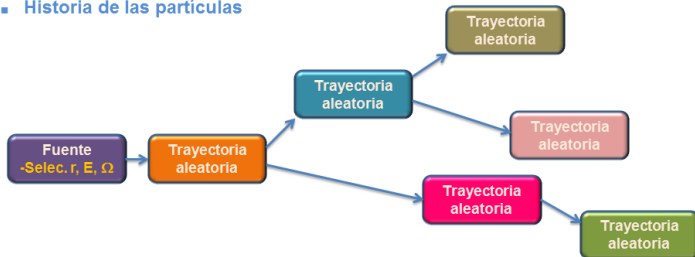
$$N(t) = N_0 e^{\alpha t} = N_0 e^{\frac{t}{T}} \quad \alpha = \frac{t}{T} \approx \frac{\ln N(t) - \ln N_0}{t - t_0} \quad (4)$$

Ésta es una " $\alpha = 1/T$ dinamica", No un eigenvalor (T periodo del Rx)

■ Trayectoria aleatoria para partículas



■ Historia de las partículas



Historia 1



Historia 2



Historia 3



Para problemas multiplicativos de fisión, otro enfoque es crear un problema estático de valor propio de la ecuación de transporte dependiente del tiempo (la solución asintótica o de estado estacionario)

- ▶ Introducir en K_{eff} un factor de escala en la multiplicación (ν) y suponer:
 - ▶ Geometría y materiales fijos
 - ▶ No hay fuentes externas: $Q(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = 0$
 - ▶ $\frac{\partial \Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} = 0$: $\nu \Rightarrow \frac{\nu}{K_{eff}}$

Haciendo $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0$ e introduciendo el eigenvalor K_{eff} da:

$$[L + T]\Psi_k(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = [S + \frac{1}{K_{eff}}M]\Psi_k \quad (5)$$

- ▶ Ecuación en estado estable, problema de eigenvalor estático para K_{eff} y Ψ_k sin dependencia en el tiempo
- ▶ K_{eff} y Ψ_k no deben utilizarse para modelar problemas dependientes del tiempo

$$[\hat{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_T(\vec{r}, E, t)] \cdot \Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \int \int \Psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}, t) \Sigma_S(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega} dE' \\ + \frac{1}{k_{eff}} \frac{\chi((\vec{r}, E, t))}{4\pi} \int \int v \Sigma_F(\vec{r}, E', t) \Psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}' dE' \quad (6)$$

Tenemos: dispersión, multiplicación, fuga y colisiones

$$[L + T]\Psi_k = [S + \frac{1}{k}M]\Psi_k \quad (7)$$

El factor $1/k$ modifica el nivel relativo de la fuente de la fisión, para equilibrar la ecuación y permitir una solución de estado estacionario

Criticidad

- ▶ Supercrítico: $K_{eff} > 1$)
- ▶ Crítico: $K_{eff} = 1$)
- ▶ Subcrítico: $K_{eff} < 1$)

Una mala interpretación común: $K_{eff} > 1$ quiere decir "la potencia incrementa"

- ▶ Para nada !!!!
- ▶ El factor $1/K_{eff}$, en la ecuación de transporte es el (eigen) valor requerido en la ecuación de balance para la solución en estado estable (eigenfunción estacionaria)
- ▶ Los diseñadores y analistas de reactores, en lugar de pensar en la reactividad como:

$$\rho = \frac{k_{eff}-1}{k_{eff}}$$

- ▶ Piensan que la reactividad es como un "potencial" para que la potencia aumente o decrezca
 - ▶ Si no se cancela por algún tipo de control, la potencia puede incrementar
 - ▶ En la práctica, reactividad positiva es anulada con reactividad negativa, por barras de control, boro soluble, venenos productos de fisión, cambios de temperatura, etc...

El trabajo de un diseñador del reactor es:

- ▶ Calcular la reactividad para una configuración específica
- ▶ Si la reactividad es positiva, se deben hacer cambios para introducir reactividad negativa y viceversa

- ▶ Función Densidad de Probabilidad & Muestreo Aleatorio
- ▶ Continua Función de Densidad de Probabilidad (PDF) y Densidad Acumulativa (CDF)
- ▶ Discreta Función de Densidad de Probabilidad (PDF) y Densidad Acumulativa (CDF)
- ▶ Media, Desviación Estándar, Desviación Estándar de la Media

Probabilidad ???

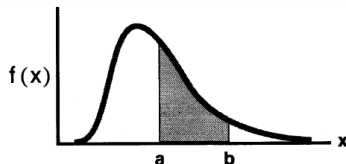
Cuáles son las probabilidades de que:

Ser auditado por el SAT este año	100	a	1
Perder su equipaje en un vuelo a USA	176	a	1
Tener 4 ases un juego de cartas	4,164	a	1
Que le caiga un rayo durante su vida	9,100	a	1
Ser golpeado por una pelota en un partido del América	300,000	a	1
Ahogarse en su bañera este año	685,000	a	1
Ganarse la lotería con una serie	146,107,962	a	1

Seguiremos esperando que se compre un billete de lotería,
pero no hay de qué preocuparse, es más probable que le caiga un rayo

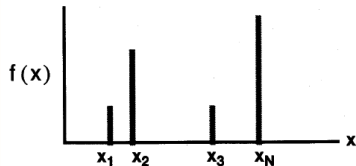
Densidad de Probabilidad Continua

- ▶ $f(x)$ función densidad de probabilidad (PDF)
 $f(x) \geq 0$
- ▶ Probabilidad $\{ a \leq x \leq b \} = \int_a^b f(x) dx$
- ▶ Normalización $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$



Densidad de Probabilidad Discreta

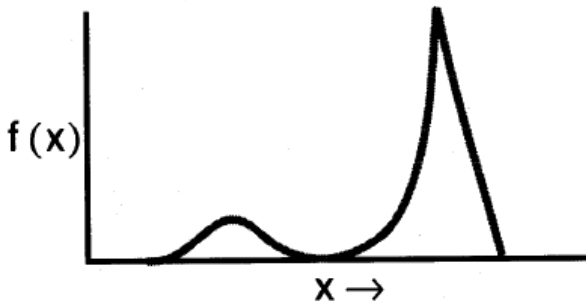
- ▶ $\{f_k\}, k = 1, 2, \dots, N$ donde $f_k = f(x_k)$
 $f_k \geq 0$
- ▶ Probabilidad $\{ x = x_k \} = f_k$
- ▶ Normalización $\sum_{k=1}^N f_k = 1$



El éxito del Método de MC, es la noción del muestreo aleatorio

El problema puede ser establecido de la siguiente forma:

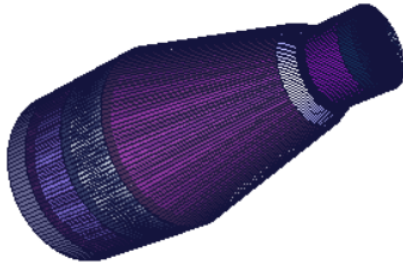
- Dada una densidad de probabilidad $f(x)$'s , se produce una secuencia de \hat{X} 's. Las \hat{X} 's deben ser distribuidas de la misma manera que $f(x)$



El uso del muestreo aleatorio distingue a MC de otros métodos

Cuando MC se emplea para resolver la integral de la ecuación de transporte de Boltzmann:

- ▶ Modelos de muestreo aleatorio, dan resultados de acontecimientos físicos. (pe. colisión de neutrones, procesos de fisión, fuentes, ...)
- ▶ Modelos de geometría computacional de acuerdo a la disposición de materiales.

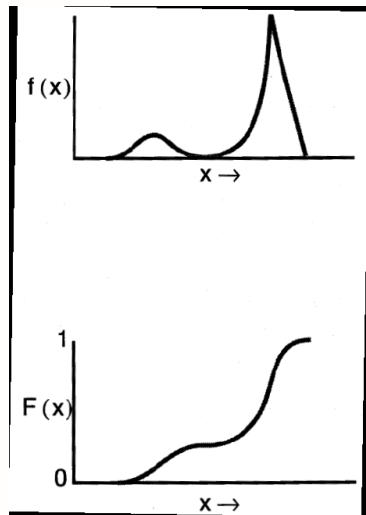


Función Densidad de Probabilidad (PDF)

- ▶ $f(x)$ función densidad de probabilidad (PDF)
 $f(x) \geq 0$
- ▶ Probabilidad $\{ a \leq x \leq b \} = \int_a^b f(x) dx$
- ▶ Normalización $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$

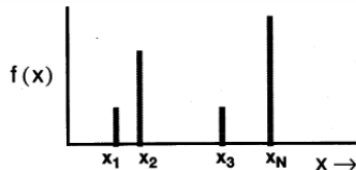
Función de Distribución Acumulativa (CDF)

- ▶ $F(x) = \int_{-\infty}^x f(x') dx'$
 $0 \leq F(x) \leq 1$
- ▶ $\frac{dF(x)}{dx} \geq 0$
- ▶ $F(-\infty) = 0, \quad F(\infty) = 1$



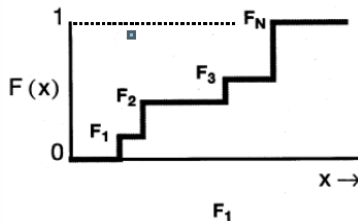
Discreta (PDF)

- ▶ $\{f_k\}$, donde $f_k = f(x_k)$ con $k = 1, 2, \dots, N$
 $f_k \geq 0$
- ▶ $\sum_{j=1}^N f_j = 1$



Discreta (CDF)

- ▶ $\{F_k\}$, donde $F_k = \sum_{j=1}^k f_j$ con $k = 1, 2, \dots, N-1$
- ▶ $F_0 = 0$
- ▶ $F_N = 1$



Dado un grupo de muestras aleatorias x_1, x_2, \dots, x_N

Media

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j \quad (8)$$

Varianza de la Población & Desviación Estándar

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j^2 - \bar{x}^2 \quad (9)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j^2 - \bar{x}^2} \quad (10)$$

Varianza & Desviación Estándar de la Media

$$\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{\sigma^2}{N} \quad (11)$$

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j^2 - \bar{x}^2} \quad (12)$$

El Código de Monte Carlo calcula valores de la media para los tallies y reporta los valores de la desviación estándar de la media

En definiciones anteriores, algunos de los términos N , deben realmente ser $N - 1$. MCNP y otros códigos, ignoran esto porque los valores de N son muy grandes