

INTRODUCCIÓN AL CÓDIGO MCNP6

Curso para principiantes

Arturo Delfín Loya

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

Agosto, 2016



instituto nacional de
investigaciones nucleares



Resumen:

Teoría: La solución de problemas de transporte de partículas por el método de **Monte Carlo (MC)** es simple, solo hay que simular el comportamiento de la partícula; el problema está en cuán detallado se requiere la simulación y lo que se desea obtener.

Estas lecciones presentan una aproximación balanceada entre la teoría y la práctica del código de simulación Monte Carlo.

Lección 1 y 2:

- ▶ Un repaso de los métodos de simulación de Monte Carlo
- ▶ La ecuación de transporte
- ▶ Muestreo aleatorio
- ▶ Geometría computacional
- ▶ Física de colisiones y
- ▶ Estadística

Lección 3, 4 y 5:

- ▶ Estados del arte en simulaciones de criticidad con Monte Carlo
- ▶ Teoría de cálculo de valores propios
- ▶ Análisis de convergencia
- ▶ k_{eff}
- ▶ Tallies
- ▶ Incertidumbres
- ▶ Caso de estudio realista ¿Chicago 9000?
- ▶ Técnicas de aceleración Wielandt
- ▶ Modelado de diferentes tipos de problemas y geometrías
- ▶ Dependencia de la temperatura, deposición de energía, etc.

Resumen

Práctica: Nos enfocamos al empleo de **MCNP6** para desarrollar archivos de entrada de cálculos de criticidad en física de reactores y sus aplicaciones.

- ▶ LA-UR-09-000380, "Criticality Calculations with MCNP5: A Primer (3rd Edition)" (se encuentra en: <http://mcnp.lanl.gov> en "Publications")
- ▶ Cálculos de criticidad para la física de reactores
- ▶ Aplicaciones de seguridad de criticidad
- ▶ Ejecutar el código
- ▶ Trazado geométrico y la visualización de resultados
- ▶ Comprensión de la salida de código
- ▶ Modelar caso realista ¿Chicago 9000?
- ▶ Realizar ejemplos que proporcionan una experiencia práctica
- ▶ Discutir cuestiones individuales y problemas con los desarrolladores MCNP6

Bienvenida

- ▶ Gracias por su asistencia al curso teórico-práctico de MCNP
- ▶ Gracias a los Físicos: Ivón y Enrique por tomar la iniciativa de impulsar el curso de MCNP

Las preguntas se pueden realizar en cualquier momento de clase

MCNP: Monte Carlo N-Particle, es un código de transporte con propósitos generales y geometría generalizada que utiliza el **Método de Monte Carlo** para la solución de problemas y que se emplea para:

- ▶ neutrones
- ▶ fotones
- ▶ electrones
- ▶ neutrones/fotones
- ▶ neutrones/fotones/electrones
- ▶ fotones/electrones y viceversa
- ▶ criticidad en sistemas físis
- ▶ cálculo de k_{eff} , etc.

El código emplea una biblioteca de datos nucleares continua en energía, basada en ENDF/B-VII (Evaluated Nuclear Data File), ENDL (Evaluated Nuclear Data Library), etc.

Teoría	Práctica
1. Repaso de Ing. Nuclear	1. Introducción
2. Fundamentos de Monte Carlo I	2. Bases de MCNP6
3. Fundamentos de Monte Carlo II	3. Cálculos de criticidad I
4. Cálculo de valores propios I	4. Geometría avanzada
5. Cálculo de valores propios II	5. Cálculos de criticidad II
6. Cálculo de valores propios III	6. Práctica I, Tanque con una solución
7. Modelo de un HTGR	7. Tallies
8. Dependencia de la temperatura	8. Física y datos nucleares
9. Deposición de energía de la fisión	9. Práctica II, Almacén de combustible
10. Interpretación de detalles y diferencias	10. Validación
11. Paralelización	11. Práctica II, Núcleo B&W
12. Modelo de incertidumbres y tolerancias	12. Física y datos nucleares
	13. Resultados con Tallies, etc.

MCNP6, puede emplear multi-núcleos y ejecutarse tan rápido como se quiera

mcnp6 i=inp <= emplea un núcleo de la máquina por default

mcnp6 i=inp tasks n <= emplea n núcleos corre n veces más rápido

Las soluciones de los ejercicios están dados en:

- ▶ La sección de ejemplos: github.com/arturodelfin/MCNP-Ejemplos
- ▶ Notas de clases

Los resultados de los ejercicios en clases fueron generados en:

- ▶ MCNP6
- ▶ por default ENDF/B-VII.0

Ejecutar los archivos de entrada con datos de bibliotecas antiguas, presentan diferentes resultados

Qué se puede hacer con MCNP?

P-01 introducción

9/29

Modelos detallados de geometría y física

- En general geometría combinatoria 3D
- Estructuras repetidas
- Geometrías de Lattice (mallas)
- Datos de interacciones físicas ENDF/B-VII

Cálculos aproximados y valores físicos

- Flujo y corriente
- Transferencia de carga y energía
- Calor de decaimiento y rapidez de reacción
- Funciones de respuesta
- Mesh Tallies
- k_{eff} , α , η , ν , Λ
- Distribución de la fisión

> 10,000 usuarios en el mundo

- Fisión y fusión de diseño de reactores
- Riesgos de criticidad en Rx
- Blindaje de radiación
- Análisis y diseño de detectores
- Registros nucleares de pozos (pemex)
- Seguridad nuclear y dosimetría
- Física médica y radioterapia
- Transmutación, activación y quemado
- Aplicaciones aeroespaciales
- Descontaminación y desmantelamiento
- Seguridad nuclear

Qué se puede hacer con MCNP?

P-01 introducción

10/29

Características únicas para el cálculo criticidad

- Entropía Shannon de una fuente de fisión para asegurar la convergencia
- Relación de dominio k_1/k_0 (pronto)
- Aceleración Wielandt (pronto)
- Geometría estocástica
- Cambios isotópicos con quemado

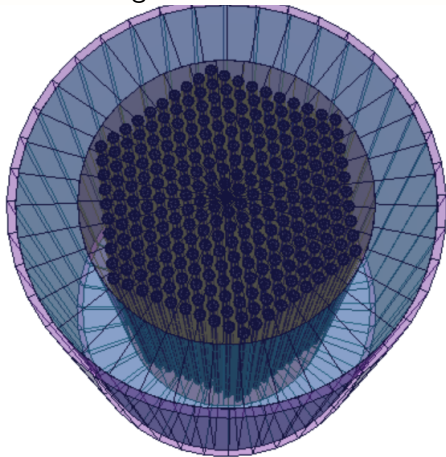
Portable en cualquier computadora

- Windows, Linux, Mac, Unix
- Multi-núcleos, clusters, notebooks, ASC,..
- Paralelizado, escalable, - MPI + multihilos
- Incorporado a visualizadores X-Served y VisEd

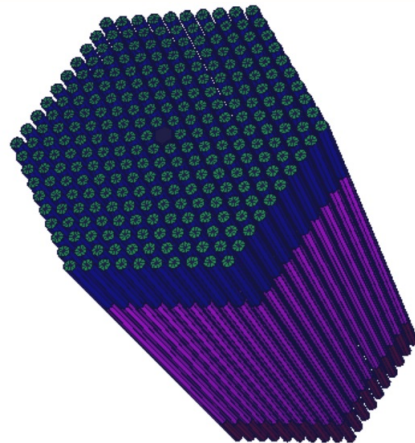
Mantenimiento

- Extensivo V&V contra experimentos
- Sitio Web, grupo de usuarios, correos-e, forum
- Clases: de 1 semana, \$

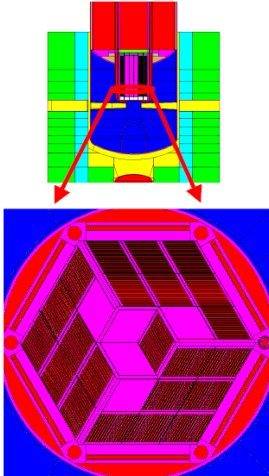
Rx Chicago 9000-IPN



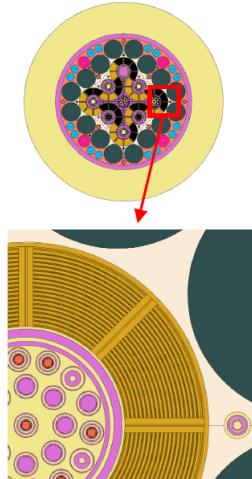
Rx TRIGA MARK III-ININ



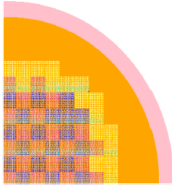
Rx MIT con puerto de haces



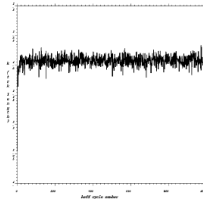
Rx de pruebas avanzado (ATR)



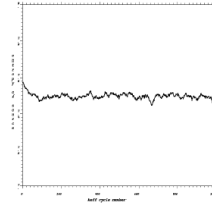
Geometría 1/4 de núcleo



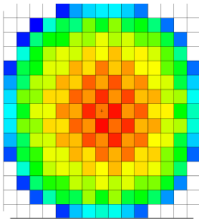
K vs Ciclo



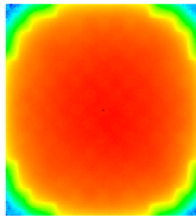
H_{SRC} vs Ciclo



Potencia de ensambles



Flujo rápido



Flujo térmico

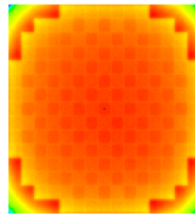


Figura : del visualizador de MCNP



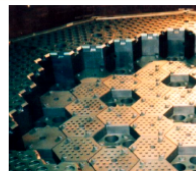
Partículas de
combustible
Triestructural-
isotopic (TRISO)



Compactación
de combustible



Ensamblajes de
combustible



Núcleo

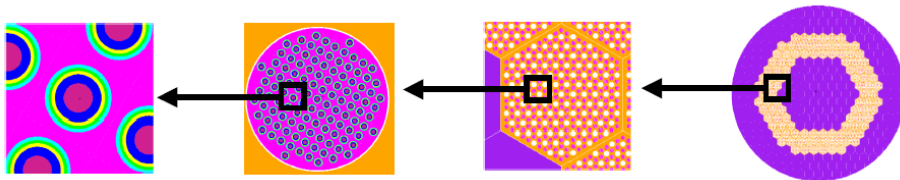
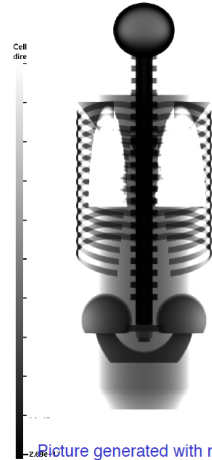


Figura : Modelo de MCNP, exactitud, de forma clara y detallada a multiples niveles

- ▶ Radiografía con neutrones y fotones, utiliza una red de detectores puntuales (píxeles)
- ▶ Cada fuente y evento de colisión contribuye a todos los píxeles
- ▶ **Simula Rayos-X y radiografía con neutrones**
- ▶ Investigar el papel de la dispersión en la imagen



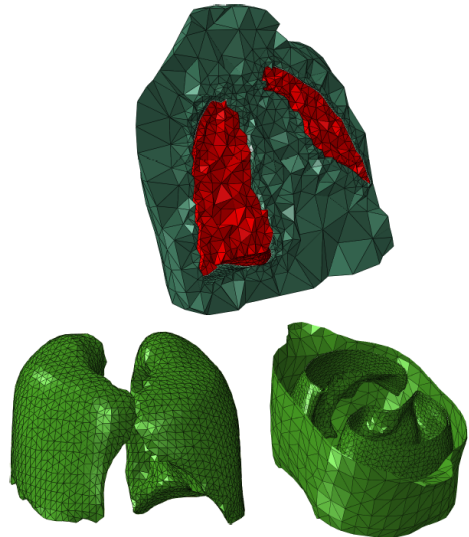
Picture from Sabrina



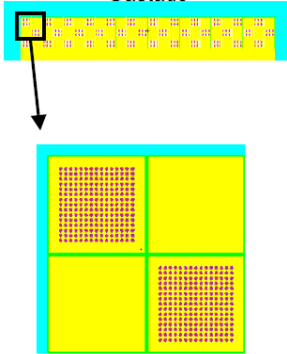
Picture generated with results from MCNP calculation.

MCNP6

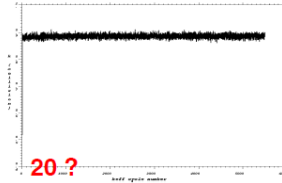
- ▶ Malla no estructurada en 3D
- ▶ Diversas aplicaciones
 - ▶ Planeación en tratamientos con radiación
 - ▶ Vinculación con Abaqus
- ▶ En desarrollo



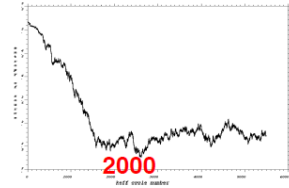
Almacen de Combustible
Gastado



K vs Ciclo

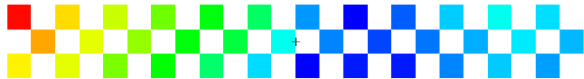


H_{SRC} vs Ciclo



DR = .99+

Distribución de calor del ensamble



- ▶ Se descargan 20 ciclos, si el cálculo fue de k_{eff} solamente
- ▶ Se descargan 2,000 ciclos, si el cálculo fue la distribución de calor

Regiones en el espacio se llaman CELDAS

- Las celdas pueden ser infinitas en extensión

Todo el espacio es particionado en celdas, sin gaps o sobreposiciones

- Celdas adyacentes comparten una o más superficies límites comunes.

SUPERFICIES

- Superficies analíticas de 1er y 2do orden, dividen el espacio en dos, uno "dentro"(-) y otro "fuera"(+)

Las celdas son definidas por:

- Intersecciones, uniones, de espacios, una lista de los números asignados de superficie; posiblemente operadores de intersección o unión.

Una colección de celdas son conocidas como UNIVERSO

- Un universo esta embebido dentro del contenedor de una celda, para prod. una geometría jerárquica.

Modelo de propiedades por celda

- Asignadas a cada celda: material, densidad, temp., importancia, número de universo,...

Un MATERIAL es una colección de isótopos

- La fracción de masa o átomos, se específica para cada isótopo.

TALLIES

- Acumula resultados de flujo, corriente o rapidez de reacción, etc

Simulación en Monte Carlo de una partícula

- ▶ Selecciona la posición, dirección y energía de una partícula fuente, en base a las especificaciones del usuario, y posiblemente a un muestreo aleatorio
- ▶ Alternan entre:
 - ▶ Seguimiento de rayos a través de la geometría, hasta que se alcanza un punto de colisión.
 - ▶ Un análisis de la física de colisiones, mediante un muestreo aleatorio a partir de las densidades de probabilidad sobre la base de datos de las secciones eficaces
- ▶ Durante la simulación, Cálculos de Tallies de interés se desarrollan, tales como flujo en una celda, etc.
- ▶ La simulación termina cuando la partícula desaparece por absorción o fuga

Se repiten los pasos anteriores para todas las partículas

Cuando termina, calcula los resultados globales promedio y las estadísticas

Modelo simplificado de una esfera desnuda HEU

- ▶ Radio de la esfera = 9.538 cm
 - ▶ Densidad HEU = 18.74 g/cm^3
 - ▶ Nuclido ZAID Fracción másica
- | | | |
|------|-------|---------|
| U235 | 92235 | 94.73 % |
| U238 | 92238 | 5.27 % |

$$\text{ZAID} = Z * 1000 + A$$

Unidades de MCNP g, cm



Densidad de Mats MCNP:	+	= densidad atómica	$atom/bar * cm$
	-	= densidad másica	g/cm^3
Frac. de nuclidos MCNP:	+	= fracción atómica	
	-	= fracción másica	

Generar y editar el archivo ipn1.txt o copiarlo del folder de "Soluciones"

Experimento de Criticidad IPN

```
c
c INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL
c Elaboro: ADL
c Email: arturo.delfin@inin.gob.mx
c
c --| Fecha de elaboracion del archivo de entrada: --
c 31 de Mayo de 2016
c
c Tarjeta de Celdas $ Comentario
c
10 100 -18.74 -10 $ Densidad en g/cm^3
20 0 +10 $ Vacio en el universo externo
c $ NOTA: Línea en blanco aquí !!!
c Tarjeta de Superficies $ Comentario
c
10 so 9.538 $ Esfera en el origen de radio 9.538
c $ NOTA: Línea en blanco aquí !!!
c Tarjeta de Datos $ Comentario
c
kcode 1000 1.0 10 50
ksrc 0.0 0.0 0.0
imp:n 1.0 0.0 $ importancia del neutron para la
c celda 10 y 20 respectivamente
m100 92235 -0.9473
92238 -0.0527
c Fin de archivo
```

Celda 20
Material=Vacío
imp:n=0

Celda 10
Material 10
imp:n=1

Superficie 10

Ejemplo: Experimento de Criticidad GODIVA

P-01 introducción

23/29

```
Experimento de Criticidad IPN
c
c INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL
c Elaboro: ADL
c Email: arturo.delfin@inin.gob.mx
c
c -- Fecha de elaboracion del archivo de entrada: --
c 31 de Mayo de 2016
c
c Tarjeta de Celdas $ Comentario
c
c 10 100 -18.74 -10 $ Densidad en g/cm^3
c 20 0 +10 $ Vacio en el universo externo
c $ NOTA: Línea en blanco aquí !!!
c Tarjeta de Superficies $ Comentario
c
c 10 so 9.538 $ Esfera en el origen de radio 9.538
c $ NOTA: Línea en blanco aquí !!!
c Tarjeta de Datos $ Comentario
c
c kcode 1000 1.0 10 50
c ksrc 0.0 0.0 0.0
c imp:n 1.0 0.0 $ importancia del neutron para la
c celda 10 y 20 respectivamente
c
c m100 92235 -0.9473
c 92238 -0.0527 5 o más espacios para la
c Fin de archivo continuación de una tarjeta
```

Celda 10

- ▶ Tiene al material 100 con densidad= 18.74 g/cm^3
- ▶ Ver la tarjeta m100 de la parte de materiales
- ▶ La superficie límite contiene solamente una superficie: -10 (dentro de 10)
- ▶ Importancia = 1 (ver tarjeta imp:n), desarrolla el seguimiento de neutrones

Celda 20

- ▶ Contiene el vacío (material 0), no es necesario escribir la densidad
- ▶ La superficie límite contiene solamente una superficie: +10 (fuera de 10)
- ▶ Importancia = 0 (ver tarjeta imp:n), se mueren todos los neutrones que llegan a esta celda

Tarjetas kcode y ksrc

- ▶ ksrc: 0, 0, 0; los neutrones inician en el centro
- ▶ 1000 n/ciclo, supone inicialmente $k_{eff} = 1$
- ▶ Descarga 10 ciclos y evalúa un total de 50

Guardar el archivo que elaboró en algún directorio de trabajo

- ▶ Abrir el command prompt de MCNP6
- ▶ y/o colocarse en el directorio de trabajo, desde el "Símbolo del Sistema": y ubicar el archivo de entrada que generó
- ▶ Realizar los siguientes pasos para ejecutarlo:
 - ▶ `mcnp6 i=ipn1 o=ipn1.o tasks 8` o
 - ▶ `MCNP6 inp=ipn1 o=ipn1 tasks 4` o
 - ▶ `MCNP6 i=ipn1.txt out=ipn1.out tasks 2` o
 - ▶ `mcnp6 inp=archivo de entrada o=archivo de salida tasks n (n=núcleos)`
- ▶ Observar qué archivos se han creado
- ▶ Analizar el archivo de salida desde un editor de texto

Haga limpieza: del out? srct? runtp? (si quiere)

Pantalla del Archivo de Salida 1

```

Code Name & Version = MCNP6, 1.0

// // // // //
// // // // //
// // // // //
// // // // //
// // // // //

+-----+
| Copyright 2008. Los Alamos National Security, LLC. All rights |
| reserved.                                                    |
| This material was produced under U.S. Government contract   |
| DE-AC52-06NA25396 for Los Alamos National Laboratory, which is |
| operated by Los Alamos National Security, LLC, for the U.S. |
| Department of Energy. The Government is granted for itself and |
| others acting on its behalf a paid-up, nonexclusive, irrevocable |
| worldwide license in this material to reproduce, prepare derivative |
| works, and perform publicly and display publicly. Beginning five |
| (5) years after 2008, subject to additional five-year worldwide |
| renewals, the Government is granted for itself and others acting on |
| its behalf a paid-up, nonexclusive, irrevocable worldwide license |
| in this material to reproduce, prepare derivative works, distribute |
| copies to the public, perform publicly and display publicly, and to |
| permit others to do so. NEITHER THE UNITED STATES NOR THE UNITED |
| STATES DEPARTMENT OF ENERGY, NOR LOS ALAMOS NATIONAL SECURITY, LLC, |
| NOR ANY OF THEIR EMPLOYEES, MAKES ANY WARRANTY, EXPRESS OR IMPLIED, |
| OR ASSUMES ANY LEGAL LIABILITY OR RESPONSIBILITY FOR THE ACCURACY, |
| COMPLETENESS, OR USEFULNESS OF ANY INFORMATION, APPARATUS, PRODUCT, |
| OR PROCESS DISCLOSED, OR REPRESENTS THAT ITS USE WOULD NOT INFRINGE |
| PRIVATELY OWNED RIGHTS.                                     |
+-----+

lmcpn  version 6      ld=05/08/13      05/31/16 20:52:13
*****
i=ipn1 o=ipn1.o tasks 8

warning. Physics models disabled.
1-      Experimento de Criticidad IPN
2-      c
3-      c      INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL
4-      c      Elabore: ADL

```

```
probid = 05/31/16 20:52:13
```


Pantalla del Archivo de Salida 3

the results of the w test for normality applied to the individual collision, absorption, and track-length keff cycle values are:

```
the k(collision) cycle values appear normally distributed at the 95 percent confidence level
the k(absorption) cycle values appear normally distributed at the 95 percent confidence level
the k(trk length) cycle values appear normally distributed at the 95 percent confidence level
```

```
the final estimated combined collision/absorption/track-length keff = 1.07750 with an estimated standard deviation of 0.00363
the estimated 68, 95, & 99 percent keff confidence intervals are 1.07383 to 1.08116, 1.07014 to 1.08486, and 1.06763 to 1.08736
the final combined (col/abs/tl) prompt removal lifetime = 6.7976E-09 seconds with an estimated standard deviation of 2.9897E-11
the average neutron energy causing fission = 1.4188E+00 mev
the energy corresponding to the average neutron lethargy causing fission = 7.9306E-01 mev
the percentages of fissions caused by neutrons in the thermal, intermediate, and fast neutron ranges are:
(<0.625 ev): 0.00% (0.625 ev - 100 kev): 5.47% (>100 kev): 94.53%
the average fission neutrons produced per neutron absorbed (capture + fission) in all cells with fission = 2.3194E+00
the average fission neutrons produced per neutron absorbed (capture + fission) in all the geometry cells = 2.3194E+00
the average number of neutrons produced per fission = 2.594
```

the estimated average keffs, one standard deviations, and 68, 95, and 99 percent confidence intervals are:

keff estimator	keff	standard deviation	68% confidence	95% confidence	99% confidence	corr
collision	1.07784	0.00421	1.07359 to 1.08208	1.06931 to 1.08636	1.06643 to 1.08924	
absorption	1.07783	0.00422	1.07358 to 1.08209	1.06930 to 1.08637	1.06641 to 1.08926	
track length	1.07737	0.00364	1.07371 to 1.08104	1.07001 to 1.08473	1.06752 to 1.08723	
col/absorp	1.07784	0.00426	1.07354 to 1.08213	1.06920 to 1.08647	1.06627 to 1.08940	0.9939
abs/trk len	1.07750	0.00358	1.07389 to 1.08111	1.07024 to 1.08476	1.06778 to 1.08722	0.6864
col/trk len	1.07750	0.00359	1.07388 to 1.08111	1.07024 to 1.08476	1.06778 to 1.08722	0.6900
col/abs/trk len	1.07750	0.00363	1.07383 to 1.08116	1.07014 to 1.08486	1.06763 to 1.08736	

Pantalla del Archivo de Salida 4

```

38 12 11939| 1.0723 0.0085 1.0709 0.0085 1.0734 0.0039 |95/95/95| 1.07365 0.00482 1.06274-1.08456 1.05799-1.08932
39 11 10926| 1.0710 0.0092 1.0694 0.0091 1.0741 0.0042 |95/95/95| 1.07567 0.00525 1.06355-1.08780 1.05804-1.09331
40 10 9920| 1.0754 0.0089 1.0740 0.0087 1.0749 0.0046 |95/95/95| 1.07568 0.00558 1.06249-1.08888 1.05616-1.09521
-----
41 9 8987| 1.0758 0.0099 1.0745 0.0097 1.0748 0.0052 |95/95/95| 1.07548 0.00626 1.06017-1.09079 1.05228-1.09869
42 8 7960| 1.0787 0.0108 1.0768 0.0107 1.0746 0.0059 |95/95/95| 1.07235 0.00876 1.04983-1.09487 1.03703-1.10768
43 7 6969| 1.0763 0.0121 1.0743 0.0121 1.0719 0.0060 |95/95/95| 1.06963 0.00865 1.04560-1.09366 1.02978-1.10947
44 6 5895| 1.0771 0.0143 1.0752 0.0142 1.0695 0.0066 |95/95/95| 1.06589 0.00643 1.04542-1.08637 1.02832-1.10347
45 5 4952| 1.0725 0.0166 1.0709 0.0166 1.0690 0.0080 |95/95/95| 1.06626 0.00641 1.03867-1.09386 1.00262-1.12991
46 4 3971| 1.0606 0.0150 1.0585 0.0142 1.0638 0.0079 |95/95/95| 1.06646 0.01546 0.86992-1.26300 0.08205-2.05087
47 3 2934| 1.0532 0.0185 1.0506 0.0168 1.0601 0.0099 |
48 2 1952| 1.0706 0.0107 1.0663 0.0104 1.0675 0.0113 |

```

the minimum estimated standard deviation for the col/abs/tl keff estimator occurs with 4 inactive cycles and 46 active cycles.

the first active half of the problem skips 10 cycles and uses 20 active cycles; the second half skips 30 and uses 20 cycles.
the col/abs/trk-len keff, one standard deviation, and 68, 95, and 99 percent intervals for each active half of the problem are:

problem	keff	standard deviation	68% confidence	95% confidence	99% confidence
first half	1.09313	0.00474	1.08827 to 1.09799	1.08313 to 1.10313	1.07939 to 1.10687
second half	1.06469	0.00442	1.06016 to 1.06922	1.05537 to 1.07402	1.05188 to 1.07751
final result	1.07750	0.00363	1.07383 to 1.08116	1.07014 to 1.08486	1.06763 to 1.08736

warning. the first and second half values of k(col/abs/trk len) appear to be different at the 99 percent confidence level.

```

dump no. 2 on file runtpg nps = 49988 coll = 179716 ctm = 0.15 nrm =
2795378

```

2 warning messages so far.

run terminated when 50 kcode cycles were done.

computer time = 0.19 minutes

mcnp version 6 05/08/13 05/31/16 20:52:14 probid = 05/31/16 20:52:13

Abrir el visualizador videdX_32, y practicar con el archivo "ipn1"

20

