FUNDAMENTOS DE MONTE CARLO - II CURSO ESFM-IPN

Arturo Delfín Loya

https://arturodelfinloya.github.io/MCNP

Agosto, 2016

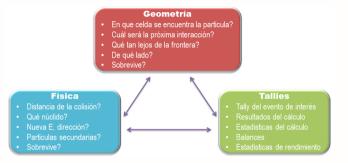




Técnicas de Cálculo

- ▶ Geometría
- Física de Colisiones
- Tallies
- ► Reducción de Varianza

"La simulación es mejor que la realidad555" Richard W. Hamming, 1991



mcnp, rcp, vim, racer, sam, cog, tart, morse, keno, tripoli, mcbend, monk, ...

- ► Rutinas de geometría determinan la celda y material en esa celda
- ► Rutinas de colisión modelan las interacciones físicas con el material

Muestreos aleatorios desde PDF´s determinados por datos de la sección eficaz.

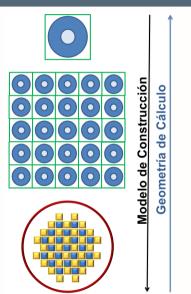
- ► Continuos: distancia de vuelo, *E* de salida y dirección
- ▶ Discreto: Selecc. el núclido, tipo de interacción, partículas secundarias,...

▶ Geometría del elemento

► Elementos → Ensambles

► Ensambles → Núcleo

Núcleo + Periféricos → Modelo 3D



Cada punto del espacio que posiblemente alcance una partícula, se debe definir en el modelo de la geometría

Volúmenes 3D se definen por sus superficies de frontera

- ► Representación de la frontera
- ► Geometría combinatoria, ya sea con superficies o cuerpos primitivos
- ► CSG geometría sólida constructiva, estructura de árbol con operadores booleanos
- ► Geometría de malla

Un número de celda es asignada a cada volumen en 3D

- Para algunos códigos, los volúmenes disjuntos deben tener diferentes números de celdas
- ▶ Para MCNP y otros, volúmenes disjuntos pueden tener el mismo número de celdas

Un número de material es asignado para cada celda

► Se supone que la composición es uniforme y homogénea dentro de cada celda Los Tallies se definen para celdas o superficies particulares, tipos de reacción, y tipos de Fn's

Ubicación

▶ Dado un punto en el espacio determinar en que celda se encuentra

Distancia a la superficie

 Dado un punto y dirección en una celda en particular, determinar la distancia a la superficie próxima de esa celda

Búsqueda del(los) vecino(s)

► Para una partícula que ha golpeado la superficie de frontera de una celda, determinar la celda siguiente a la que entrará

Condiciones de frontera

► Para una partícula que ha golpeado la superficie de frontera de una celda declarada como periódica o reflejante, determinar la nueva dirección, posición y la celda siguiente a la que entrará

```
Repetir para todos los ciclos
. . . Repetir para todas las historias en el ciclo
. . . . . . Fuente
. . . . . Localización de la partícula
. . . . . . Repetir hasta la colisión
. . . . . . . . Repetir para cada nivel de la geometría
. . . . . . . . . . . . . Repita para superficies de la región de 3D
. . . . . . . . . . . . . . . Cálculo de la distancia
. . . . . . . . Cruce de fronteras
..... Búsqueda del(los) vecino(s)
.... Ruleta/División
. . . . . Análisis de colisión
. . . . . Ruleta/División
```

El cálculo de un reactor requiere $\approx 10^{10}$ cálculos de distancia

MCNP usa "geometría combinatoria" basada en superficies

- Define superficies
- ► Define celdas usando superficies y operadores (intersección, unión, complemento)
- ► Puede agrupar celdas en un universo, e incrustar ese universo dentro de otra celda
- ► Puede agrupar celdas en un universo, y repetir ese universo en una malla, e incrustar ese universo dentro de otra celda
- Asignar materiales a celdas
- ► Asignar otras propiedades a celdas (pe. importancia, pesos)
- ► Definir tallies usando números de celda o superficie

En MCNP los tipos de superficie incluyen:

- ► 1st orden: planos
- $ightharpoonup 2^{nd}$ orden: Esferas, cilindros, conos, elipsoides, hiperboloides, paraboloides, cuadrática en general
- ▶ 4^{th} orden: Toroide elíptico y circular (eje paralelo a (x, y, oz)

Cuadrática polinomial para superficie:

$$F(x, y, z) = ax^{2} + by^{2} + cz^{2} + dxy + eyz + fzx + gx + hy + jz + k$$
 (1)

- La superficie es definida por F(x, y, z)
- ► La superficie es definida o cerrada
- ► Convención de normalización: El factor de segundo orden es positivo

Para un punto dado en el espacio (x, y, z), y una ecuación de superficie F(x', y', z') = 0, el sentido del punto con respecto a la superficie es definido por:

Dentro de la superficie	Sentido < 0	si	F(x, y, z) < 0
Fuera de la superficie	Sentido > 0	si	F(x,y,z) > 0
En la superficie	Sentido $= 0$	si	F(x, y, z) = 0



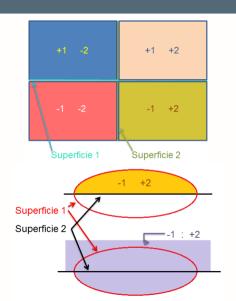
Si no está seguro de qué cara es + o -, seleccione un punto y sustituto en función de la superficie, F(x, y, z), ver si el resultado es + o -

Intersección

Convención MCNP: +1-2 == intersección del lado positivo de la superficie 1 y negativo de lado de la superficie 2

Unión

Convención MCNP: Dos puntos ":" significa el operador unión, -1:+2== unión del lado negativo de la superficie 1 con positivo de lado de la superficie 2



Una celda se define como

Intersección de medios-espacios definidos por una lista de números asignados de superficie

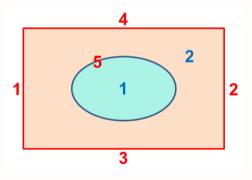
- ► Ejemplo celda 1 -5
- ► celda 2 +1 -2 +3 -4 +5

Unión de medios-espacios definidos por números asignados de superficie

- ► Ejemplo celda 6 +1:-2
- El complemento de otra celda
 - ► Ejemplo celda 7 #5

Una combinación de las anteriores

► Ejemplo celda 8 (+1 -2) : 3 #5



Dados los puntos (x, y, z), determina qué celda está contenida:

```
Para(celda = 1 \dots n celdas) {
      Para cada superficie en la celda {
            Evaluar S_{superficie} = asigna F_{superficie} (x, y, z) 
            La S_{superficie} = coincide con el sentido de la definición de la celda?
      Si todos los sentidos de (x, y, z) coinciden con la definición de la celda;
      entonces salir en regresar la celda como resultado
```

Dados los puntos (x, y, z) en la celda I, determina la distancia a la frontera de la celda:

```
d ← infinito
       Para cada superficie en la celda I {
            Si la superficie es parte de la frontera externa de la celda I {
                Evaluar d_{sup} = la raíz más pequeña positiva de
                                F_{sup}(x + du, y + dv, z + dw) = 0
               d = min(d, d_{sun})
      entonces regresar el valor de d como resultado
```

15/47

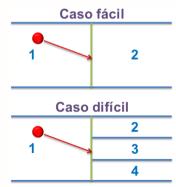
Cuando la frontera de una celda de alcanza, qué está en el otro lado?

La mayoría de los códigos construyen "lista de vecinos" durante el seguimiento

- Para cada superficie de frontera de la celda, hay que recordar la lista de vecinos
- ► Inicialmente la lista de vecinos está vacía
- Comprobar todos los elementos que tienen en común la superficie, hasta encontrar uno que satisface todas las condiciones del sentido de posición de la partícula
- Salvar, y más tarde checar primero la lista si es necesario

Al principio la búsqueda de vecinos es caro, después

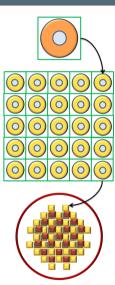
es barato
Seguimiento se acelera
conforme avanza el cálculo

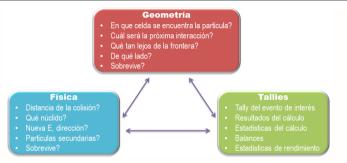


La mayoría de las aplicaciones en el mundo real, es necesario para el modelado de la geometría detallada, la repetición de unidades

Todos los códigos de producción de Monte Carlo, tienen capacidad para múltiples niveles de la geometría anidada

- ► Llamada "Universo" en MCNP
- colección de celdas debe ser agrupada en un "universo"
- El universo debe estar contenido en otra celda, con el universo recortado por la frontera de la celda.





mcnp, rcp, vim, racer, sam-ce, tart, morse, keno, tripoli, mcbend, monk, ...

- ► Rutinas de geometría determinan la celda y material en esa celda
- ► Rutinas de colisión modelan las interacciones físicas con el material

Muestreos aleatorios desde PDF's determinados por datos de la sección eficaz.

- ► Continuos: distancia de vuelo, *E* de salida y dirección,...
- ▶ Discreto: Selecc. el núclido, tipo de interacción, partículas secundarias,...

Después que una partícula emerge dela fuente o la colisión, o si ésta en la superficie de frontera de una celda:

- Muestrea al azar la distancia de vuelo libre hasta la siguiente interacción
- ► Si la distancia a la interacción es menor que la distancia a la frontera de la celda, entonces coloca la partícula hasta el punto de interacción
- Física de la colisión en el punto de intersección:
 - ► Determinar con qué isótopo es la interacción
 - Determinar el tipo interacción para ese isótopo
 - ► Determinar la energía y dirección de salida de la partícula
 - ▶ Determinar si se producen partículas secundarias
 - Ajustar pesos y normalización
 - Tallies y cálculos de interés



Dada una partícula en (x_0, y_0, z_0) en la dirección (u, v, w) en la celda que contiene material M, el Muestreo la distancia de vuelo libre a la siguiente interacción:

- Σ_T = sección eficaz macroscópica total en el material M = $\sum N^j \sigma_T^j$, donde j =isótopos en el material M = probabilidad de interacción por unidad de distancia, $[cm^{-1}]$
- ▶ PDF para la distancia de vuelo s, donde $0 \le s \le \infty$, f(s) = PIUD * PTDSI PIUD = probabilidad de interacción por unidad de distancia, PTDSI = probabilidad de viajar una distancia s sin interaccionar $= \sum_{T} e^{-\sum_{T} s}$
- ► Procedimiento de muestreo $f(s) = 1 - e^{-\Sigma_T s} \rightarrow s = -\ln(1 - \xi)/\Sigma_T$

Se supone que el material M es uniforme y homogéneo

- $\Sigma_T = \sum_j N^j \sigma_T^j$, donde j es el isótopo en el material M
- Probabilidad que colisione con el isótopo j

$$p_j = \frac{N^j \sigma_T^j}{\sum_k N^k \sigma_T^k} \tag{2}$$

- $p_j =$ Es el conjunto de probabilidades discretas para seleccionar isótopo colisión
- ▶ $P_j = \mathsf{PDF}$ Discretas, $P_j = \sum_i p_i$ $i = 1, ..., j, P_0 = 0$
- Muestreo discreto para isótopos colisión k

Búsqueda en tabla para determinar k tal que $P_{k-1} \le \xi \le P_k$

▶ Para la colisión del isótopo k

$$\sigma_T = \sigma_{el\acute{a}stica} + \sigma_{inel\acute{a}stica} + \sigma_{captura} + \sigma_{fisi\acute{o}n} +$$

Entonces la probabilidad de reacción tipo j para el isótopo k es:

$$p_j = \frac{\sigma_j}{\sigma_T} \tag{3}$$

- $ightharpoonup p_j =$ Es el conjunto de probabilidades discretas para seleccionar tipo de reacción j
- ▶ $P_j = \mathsf{PDF}$ Discretas, $P_j = \sum_i p_i$ $i = 1, ..., j, P_0 = 0$
- Muestreo discreto para el tipo de reacción j

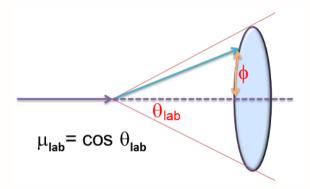
Búsqueda en tabla para determinar j tal que $P_{j-1} \le \xi \le P_j$

Dado el tipo de colisión de un isótopo k y el tipo de reacción j, las técnicas de muestreo aleatorio que se utilizan para determinar la energía de salida E' y la dirección (u', v', w'), dependerá de:

- Conservación de energía y momentum
- ► Leyes de la dispersión ya sea ecuaciones o datos tabulados

Ejemplos:

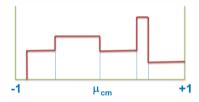
- ► Dispersión isotrópica en el sistema de laboratorio
- Dispersión multigrupos
- ► Dispersión elástica con objeto en reposo
- Dispersión inelástica
- Otras colisiones físicas



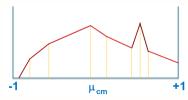
- lacktriangle Muestrea μ_{cm} a partir de los datos tabulados PDF
- lacktriangle Utiliza la cinemática para obtener $E^{'}_{lab}$ y μ_{lab}
- Muestrea de manera uniforme el ángulo polar ϕ en $(0,2\pi)$
- Girar la dirección de partículas usando μ_{lah} y ϕ

Representación típica de $f(\mu_{cm})$

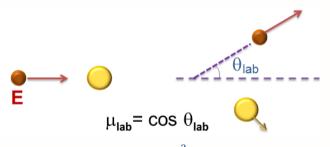
► Histograma o equiprobable histograma de PDF



► Línea espaciada de PDF



Dispersión elástica con blanco en reposo en el sistema de laboratorio - Cinemática



$$E' = E \frac{A^2}{(A+1)^2}$$

$$\mu_{lab} = \frac{1 + A\mu_{cm}}{\sqrt{A^2 + 2A\mu_{cm} + 1}}$$

donde A =(masa del blanco) / (masa de la partícula)

Rotación desde (u,v,w) a (u',v',w') usando μ_{lab} y ϕ

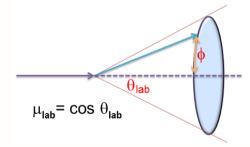
$$\mu = \mu_{lab}$$

$$\phi = 2\pi\xi$$

$$u' = \mu u + \frac{\sqrt{1 - \mu^2}(uwcos\phi - vsen\phi)}{\sqrt{1 - w^2}}$$

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

$$w' = \mu w - \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - w^2} \cos \phi$$



Si μ es cercano a 1 (9) Se puede emplear codificación especial para evitar redondear

Regla 1	Regla 1 de ENDF	Equiprobable energía
Regla 2	Energía de los	
	fotones discreta	
Regla 3	Regla 3 de ENDF	Dispersión inelástica de los niveles nucleares
Regla 4	Regla 4 de ENDF	Distribución tabular
Regla 5	Regla 5 de ENDF	Espectro de evaporación general
Regla 7	Regla 7 de ENDF	Espectro de fisión Mawell simple
Regla 9	Regla 9 de ENDF	Espectro de evaporación
Regla 11	Regla 11 de ENDF	Espectro de Watt dependiente de la Energía
Regla 22	Regla 2 de UK	Funciones lineales tabulares de la energía incidente final
Regla 24	Regla 6 de UK	Multiplicadores de energía equiprobables
Regla 44	Regla 1 de ENDF	lang 2, Kalbach-87 correlaciona la dispersión angular con la energía
Regla 61	Regla 11 de ENDF	lang 0, 12, o 14 correlaciona la dispersión angular con la energía
Regla 66	Regla 6 de UK	Distribución del espacio de fase de N-cuerpos
Regla 67	Regla 7 de ENDF	Correlaciona la dispersión angular con la energía

- ► Emisión de la fisión
- Emisión de neutrones retardados
- ► $S(\alpha, \beta)$ Dispersión de neutrones térmicos
- Dispersión en gas libre (free-gas) para neutrones
- ► Tablas de probabilidad para el rango de energía de resonancia de neutrones sin resolver
- Efecto fotoeléctrico
- Producción de pares
- Dispersión Compton (incoherente)
- Dispersión Thomson (coherente)
- emisión de fluorescencia

- ▶ Reacciones fotonucleares
- ► Interacción de electrones aproximación de historia condensada (transporte de electrones de baja energía con material de alto número atómico)
 - Potencial de frenado
 - Straggling (pérdida de energía)
 - ► Deflexiones angulares
 - Bremsstrahlung
 - ► Ionización por impacto K-shell y transiciones Auger
 - Choque contra electrones

Consideración de fisiones que resultan en fisión

$$wgt \bullet \frac{v\sigma_f}{\sigma_T}$$

► Para determinar el número de neutrones producidos en la colisión

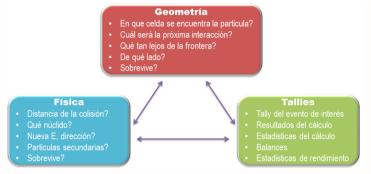
Hacer
$$r = wgt \bullet \frac{v\sigma_f}{\sigma_T}$$

 $n = int[r]$

Entonces: Produce n neutrones de fisión con probabilidad 1 y un neutrón de fisión adicional con probabilidad r-n

Ejemplo:
$$wgt \bullet \frac{v\sigma_f}{\sigma_T} = 1,75$$

Si $\xi \leq .75$, produce 2 neutrones, de otra forma produce 1
o
Produce $int[1,75+\xi]$ neutrones



mcnp, rcp, vim, racer, sam-ce, tart, morse, keno, tripoli, mcbend, monk, ...

- Durante una historia, Tally de los eventos de interés
- ► Al término de una historia, se acumulan los resultados totales y los cuadrados
- Después de completar todas las historias, calcular los resultados promedio y las desviaciones estándar

- ► Tallies de corriente
 - Determina el cruce en una superficie
- ► Tallies de flujo
 - Determina la longitud de la trayectoria
 - determina la colisión Determina el cruce en una superficie
 - determina el siguiente evento
- ► Tallies de rapidez de reacción
 - Cualquiera de los resultados del flujo determinados en el punto anterior, multiplicados por la sección eficaz
- ► Tallies de transferencia o deposición de energía
 - Cualquiera de los resultados del flujo determinados anteriormente, multiplicados por la Σ_T multiplicados por la energía depositada por colisión

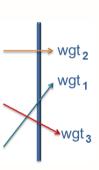
- ► Para cada superficie de cruce de partículas, se contabiliza el peso de partículas
- ► Para determinar la corriente, se divide por peso total de inicio y el área de la superficie

$$J = \frac{1}{WA} \sum_{j} wg t_{j}$$

 $j={
m todas}$ las partículas que cruzan la superficie $W={
m peso}$ total de inicio

A = área de la superficie

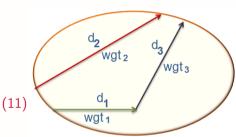
- ► Típicamente, se mantiene separado el Tally para la corriente parcial hacia el exterior para cada superficie de una celda
- ► La corriente neta se consigue combinando las corrientes parciales



- Para cada trayectoria de la partícula dentro de una celda, Tally (* peso de la longitud de trayectoria)
- Para determinar la flujo, se divide por el volumen de la celda y peso total de inicio

$$J = \frac{1}{WV} \sum_{j} d_{j} \bullet wgt_{j}$$

j = todas las partículas en la celda W = peso total de inicioV = volumen de la celda

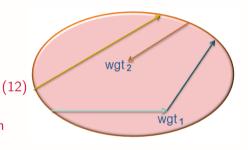


- Como $\Sigma_T \phi$ es la rapidez de colisión, el Tally $\frac{wgt}{\Sigma_T}$ determina el flujo
- Dividiendo por el peso total de inicio y el volumen de la celda

$$\phi = \frac{1}{WV} \sum_{j} \frac{wgt_{j}}{\Sigma_{T}(E_{j})}$$

 wgt_j = peso de las partículas que entran en colisión

W =peso total de inicio V =volumen de la celda



- ► Tally (Cálculo aproximado de flujo) • (Sección eficaz)
- Ejemplo: Tally de longitud de trayectoria

Después de cada trayectoria	Tally
Flujo	$wgt \bullet d_j$
Absorción total	$wgt \bullet d_j \bullet \Sigma_A$
Nu-Fisión	$wgt \bullet d_j \bullet \nu \Sigma_F$
Absorción en U-235	$wgt \bullet d_j \bullet N^{U^{235}} \sigma_A^{U^{235}}$



mcnp, rcp, vim, racer, sam-ce, tart, morse, keno, tripoli, mcbend, monk, ...

- ► Reducción de varianza
 - ► Modificar los PDF's en la física de interacciones para favorecer eventos de interés
 - ▶ Uso de splitting/rouletting para aumentar partículas en ciertas regiones geométricas
 - Matar las partículas en lugares que no interesan en el problema
- ▶ Puede que sean necesarias con el fin de probar eventos raros
- ► Más muestras (con menos peso cada una) → menor varianza en Tallies

▶ Dada una función R(x), donde x es una variable aleatoria con PDF f(x), El valor esperado de R (x) es:

$$\mu = \int R(x)f(x)dx \tag{13}$$

La varianza de R (x) es:

$$\sigma^2 = \int R(x)^2 f(x) dx - \mu^2 \tag{14}$$

Método de Monte Carlo para estimar μ Tomar N muestras aleatorias de f(x), entonces:

$$\bar{R} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} R(\hat{x}_j) \tag{15}$$

$$\sigma_{\bar{R}}^2 \approx \frac{1}{N-1} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} R^2(\hat{x}_i) - \bar{R}^2 \right]$$
 (16)

► El valor de la media esperada no se cambia por la reducción de la varianza

$$\mu = \int R(x)f(x)dx = \int R(x)\frac{f(x)}{g(x)} \bullet g(x)dx \tag{17}$$

$$\int R(x) \frac{f(x)}{g(x)} \bullet g(x) dx$$
; muestra x' para $g(x) \to \text{Tally } R(x') \frac{f(x')}{g(x')}$

 $\int R(x) f(x) dx$; muestra x' para $f(x) \to \text{Tally } R(x')$

La varianza se cambia debido al esquema de muestreo alterado

$$\sigma^{2} = \int [R(x)]^{2} f(x) dx - \mu^{2} = \int \left[R(x) \frac{f(x)}{\sigma(x)} \right]^{2} \bullet g(x) dx - \mu^{2}$$
 (18)

ightharpoonup Objetivo: Elija g(x) tal que se reduzca la varianza

► Truncamiento

- Elimina las partículas de lugares del espacio de fase que no contribuyen de manera significativa a los Tallies

► Control de la población

- Utiliza la división (splitting) de las partículas y la ruleta rusa para controlar el número de muestras tomadas en diferentes regiones del espacio de fase

Modificado del muestreo

- Modificar los archivos PDF que representan problemas físicos, para favorecer los Tallies de interés

Métodos deterministas

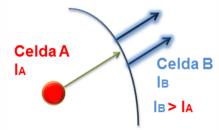
- Reemplaza partes de la trayectoria aleatoria de partículas por resultados esperados obtenidos a partir de un cálculo determinista

MCNP cuenta con 14 técnicas de reducción de varianza

- 1. Cortes en tiempo y energía
- 2. Geometría: división (splitting) y ruleta
- 3. Ventanas en los pesos
- 4. Transformación exponencial
- 5. Colisiones forzadas
- 6. Energía: división (splitting) y ruleta
- 7. Tiempo: división (splitting) y ruleta
- 8. Detectores puntuales y anillos
- 9. DXTRAN
- 10. Captura implícita
- 11. Corte en los pesos
- 12. Personalización de la fuente general
- 13. Desviación de partículas secundarias
- 14. Desviación de energía de radiación de frenado

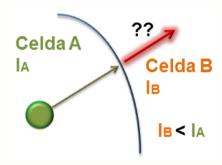
- ► Aumentar el número de partículas en las regiones "importantes", disminuye el número de partículas en las regiones "sin importancia"
- Asignar a cada celda una importancia I_{cell}
 - Arbitrarias, utiliza la mejor respuesta o flujos adjuntos de algún cálculo determinista
 - Puede usar un valor para todas las energías o valores distintos para los diferentes rangos de energía
 - Puede usar un valor para todas las energías o valores distintos para los diferentes rangos de energía
 - Valor alto → más importancia
 - $I_{cell} > 0$
 - $I_{cell} = 0$ forma de declarar regiones sin problema físico
 - Valores de I_{cell} < 0 no deben cambiar durante el cálculo de Monte Carlo

- Modificar la simulación de la trayectoria aleatoria donde cruzan la superficie:
 - Si $\frac{I_{entra}}{I_{sale}}$ > 1 lleva a cabo la división (splitting)
 - Si $\frac{I_{entra}}{I_{sale}}$ < 1 lleva a cabo la Ruleta Rusa
- Permita: $r = \frac{I_B}{I_A}$ n = [r]



- ► Si n > 1 dividir en n partículas con peso $\frac{wgt}{n}$
 - Todas las n partículas que salen de la división tienen atributos idénticos (por ejemplo, (x, y, z, u, v, w, E) incluyendo $wgt' = \frac{wgt}{n}$
 - Todas las n partículas de una división son parte de la misma historia, y sus Tallies deben combinarse
 - Típicamente, (n-1) partículas están banqueadas, 1 de las partículas es seguida hasta su muerte, a continuación, una partícula se saca del banco y se sigue, etc.
- ► Evitar el exceso de división
 - Dividiéndose en un gran número de partículas puede aumentar el tiempo de CPU y dar lugar a sesgos (aparentes) en los resultados
 - Por lo general, elegir importancias de celdas para dividir 2-por-1 o 3-por-1
 - Típicamente, puede limitar la separación de *n*-por-1 o menos
- ► El peso total de las partículas se conserva exactamente en la división

Permita: $r = \frac{I_B}{I_A}$



- ▶ Si r < 1, juegue la Ruleta Rusa
 - Con probabilidad r, mantener la partícula y alterar su peso a $(\frac{wgt}{r})$
 - Con probabilidad (1-r), matar a la partícula (escoger su peso = 0) si $\xi < r$, $wgt' = \frac{wgt}{r}$, de lo contrario wgt' = 0,

- La ruleta rusa se combina con eficacia con partículas de valores de bajo peso partículas con uno de mayor peso
- El peso total de las partículas sólo se conserva estadísticamente (valor esperado)
- Grandes fluctuaciones en el peso de las partículas, contribuyen a que el Tally tenga la varianza más grande
 - El peso de la ventana impiden que el peso de las partícula se vuelva demasiado grande o demasiado pequeña

Pesos muy grandes, → división (splitting), Pesos muy pequeños, → Ruleta Rusa Los pesos en ventanas pueden ser aplicados en cualquier momento - después de colisiones, después de que crucen la superficie, ...

