

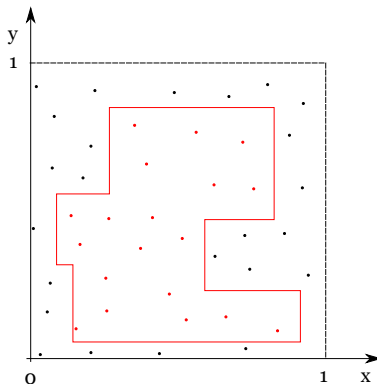
# HERRAMIENTAS DE SOFTWARE LIBRE EN NEUTRÓNICA COMPUTACIONAL: REPASO DE MÉTODO MONTE CARLO.

J.I. Márquez Damián

Instituto Balseiro  
Universidad Nacional de Cuyo

El método Monte Carlo es un método para la resolución de problemas matemáticos a través de la simulación de procesos aleatorios.

Ejemplo:



$$A \simeq \frac{N'}{N + N'}$$

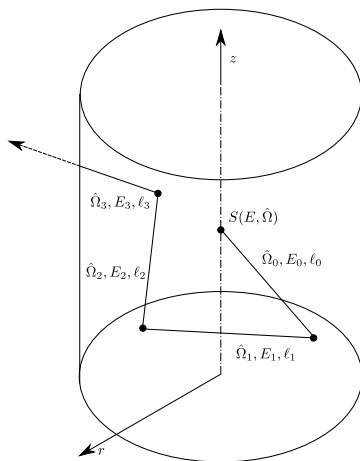
Los procesos de transporte de neutrones son intrínsecamente probabilísticos:  $\Sigma dx$  define una probabilidad de interacción en el diferencial  $dx$ , y  $\Sigma_x/\Sigma_t$  es la probabilidad de que una reacción sea del tipo  $x$ . Por otra parte, la probabilidad de interacción depende del estado de las partículas en un instante (posición, energía, dirección), pero no de sus propiedades anteriores. Estas dos características permiten modelar el sistema como una *cadena de Markov*.

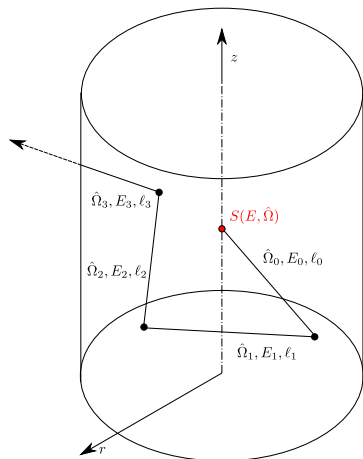
El método Monte-Carlo para el transporte de radiación se compone básicamente de los siguientes pasos:

1. Muestreo de la fuente.
2. Cálculo de la posición de la próxima interacción.
3. Análisis del tipo de interacción (cambio de dirección y/o energía en el caso de dispersión, generación de nuevas partículas en el caso de fisión, desaparición de la partícula en el caso de absorción, etc).  
(los pasos 2 y 3 se repiten hasta que la partícula es absorbida o se fuga del sistema)

Estos pasos constituyen una cadena de Markov. Se puede demostrar que estos pasos, combinados con la utilización de un estimador estadístico apropiado para el flujo neutrónico, constituyen una solución de la ecuación de transporte en su forma integral[\*].

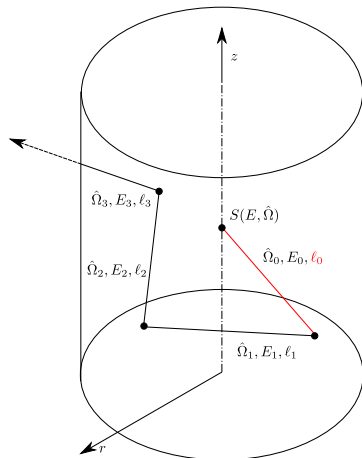
[\*]Spanier, Gelbard. "Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems", cap. 2.





## Muestreo de la fuente:

Los procesos de emisión de neutrones son estocásticos, y están determinados por distribuciones: energéticas (espectro), angulares, de posición. El proceso de muestreo de la fuente implica obtener valores para las variables de la partícula emitida (energía, dirección, posición) de las distribuciones que caracterizan la fuente.

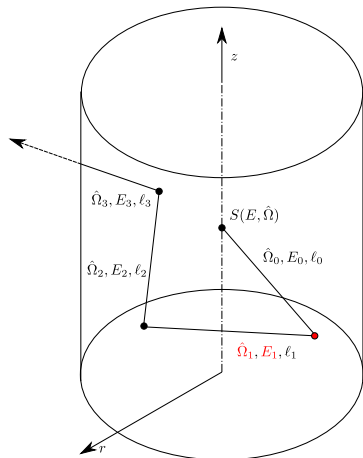


## Cálculo de la posición de la próxima interacción:

En ausencia de fuerzas que afecten la trayectoria, el neutrón viajará en línea recta en dirección  $\hat{\Omega}_0$ . La probabilidad acumulada de interacción está dada por:

$$P(\ell) = 1 - \exp(-\Sigma_t \ell)$$

La distancia de vuelo se obtiene muestreando esta distribución.



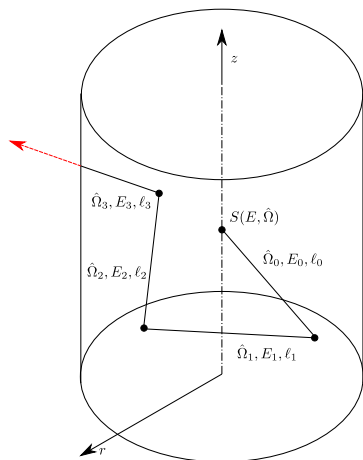
## **Análisis del tipo de interacción:**

La probabilidad de cada tipo de interacción está dada por:

$$p_i = \frac{\Sigma_i}{\Sigma_t}$$

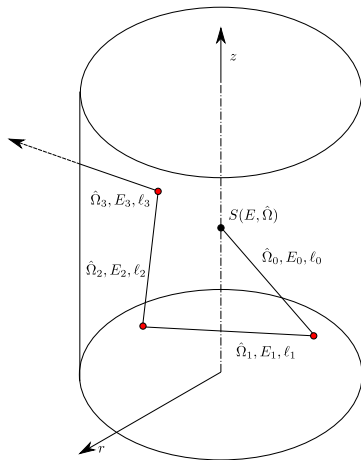
Si el evento es de dispersión (scattering), se deben muestrear las distribuciones de energía y dirección de salida para obtener los valores de  $\hat{\Omega}_1, E_1$ .





## Fin de la simulación de esta partícula:

La simulación de la partícula termina con su absorción o fuga. La simulación continúa muestreando una nueva partícula de fuente, hasta llegar al número total de partículas de fuente simuladas ( $N$ ).



## Estimadores de flujo: colisiones

La cantidad  $c_i$  de colisiones para cada partícula simulada permite calcular el ritmo de colisiones:

$$\tilde{c} = \frac{1}{N} \sum_i c_i$$

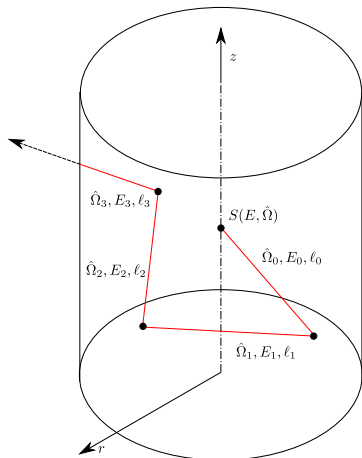
El valor medio del ritmo de colisiones está relacionado con el flujo por:

$$\bar{c} = \bar{\Sigma}_t \bar{\phi} V$$

Por lo que el flujo puede estimarse como:

$$\tilde{\phi} = \frac{1}{V} \frac{1}{\bar{\Sigma}_t} \frac{1}{N} \sum_i c_i$$

¿Y si el volumen está vacío?



## Estimadores de flujo: tracks

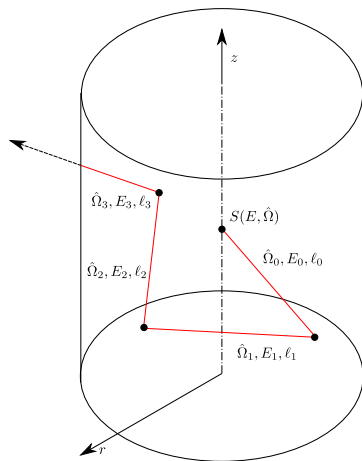
Habíamos visto que:

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \equiv v n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$$

Si integramos el flujo angular en un volumen  $dV$  y sabiendo que  $v dt$  es el camino recorrido en un tiempo  $dt$ :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV dE d\hat{\Omega} dt = \\ n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV dE d\hat{\Omega} v dt \end{aligned}$$

vemos que la integral del flujo escalar en el volumen es la suma de los caminos recorridos por las partículas contenidas en el espacio de fase  $d\hat{\Omega} dE$ .



## Estimadores de flujo: tracks

Integrando en ángulo y energía se obtiene:

$$\int_V \phi = \text{camino total recorrido}$$

El camino total recorrido puede estimarse por Monte Carlo como:

$$\tilde{\ell} = \frac{1}{N} \sum_i \sum_j \ell_j$$

y el flujo puede estimarse como:

$$\tilde{\phi} = \frac{1}{V} \frac{1}{N} \sum_i \sum_j \ell_j$$

Este estimador es particularmente útil para sistemas ópticamente delgados.

- El método Monte Carlo requiere la generación de números aleatorios. Los números aleatorios son números reales entre 0 y 1 generados con una probabilidad uniforme.
- Si bien se pueden generar "verdaderos" números aleatorios en una computadora (y son necesarios para algunas aplicaciones, como criptografía), en la simulación Monte Carlo es mejor utilizar números pseudo-aleatorios, esto es, secuencias de números con propiedades aleatorias, pero repetibles.
- Un ejemplo de algoritmo muy usado para la generación de números aleatorios es el *linear congruential method*:

$$\begin{aligned}x_i &= (ax_{i-1} + b) \% m \\ \xi_i &= \frac{x_i}{m} \\ a &= 2^7 + 1, \quad b = 1, \quad m = 2^{35}\end{aligned}$$

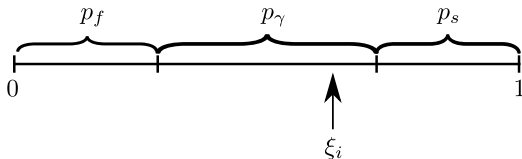
donde  $\%$  indica el operador de resto en la división entre enteros. Para un valor inicial o *semilla*  $x_0$ , la secuencia queda determinada.

- Cuando el generador de números aleatorios vuelve a generar el número  $x_0$ , la secuencia se repetirá y esto determina su *período*.
- Para asegurar la repetitividad de una simulación, y permitir la simulación de partículas en paralelo, en los cálculos Monte Carlo se suelen asignar bloques de números aleatorios a la simulación de cada partícula. Esto se denomina "paso" o *stride*.
- Si se necesitan  $n$  números aleatorios para seguir una partícula (*stride*), y se quieren simular  $N$  partículas, el período del generador de números aleatorios debería ser mayor a  $n \cdot N$ . Para resolver esta limitación se pueden utilizar estos números aleatorios como semillas para otro algoritmo.
- Si se supera el *stride* o período de un generador de números aleatorios se puede comprometer la calidad de la simulación, pero como los números aleatorios se utilizan para distintas aplicaciones esto no es necesariamente un problema.

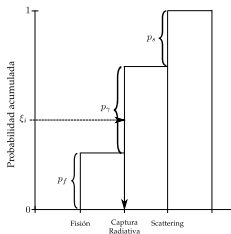
- El cálculo por el método Monte Carlo requiere tomar decisiones en base a distribuciones de probabilidad.
- Por ejemplo, si en un material  $\Sigma_f$  es la sección eficaz de fisión,  $\Sigma_\gamma$  es la sección eficaz de captura radiativa, y  $\Sigma_s$  es la sección eficaz de scattering (y son las únicas reacciones posibles) sus probabilidades son:

$$p_f = \frac{\Sigma_f}{\Sigma_t}, \quad p_\gamma = \frac{\Sigma_\gamma}{\Sigma_t}, \quad p_s = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$$

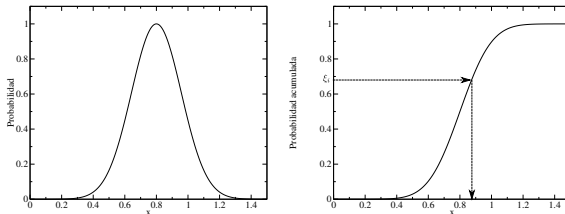
- Tomar la decisión, o muestrear esta distribución de probabilidad, es equivalente a encontrar la posición del número aleatorio  $\xi_i$  en el vector de probabilidades acumuladas:



- El muestreo de la distribución discreta se puede graficar como:



- El equivalente para una distribución continua de probabilidad es:





Esto puede realizarse:

1. Calculando analíticamente la función de probabilidad acumulada e invirtiendo la función, o
2. Utilizando un método de rechazo en la función de probabilidad. Esto es, generando valores aleatorios de  $x$  y aceptando el valor si  $\xi_i < p(x)$ .

La primera opción es preferible, pero no siempre es posible. La segunda opción es más sencilla, pero más costosa computacionalmente.

- Duderstadt, Martin. *Teoría de Transporte*. Compañía Editorial Continental, 1979.
- Lewis, Miller. *Computational Methods of Neutron Transport*. Wiley, 1984.
- Spanier, Gelbard. *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Dover, 2008.
- Brown. *Fundamentals of Monte Carlo Particle Transport*. Tech. Rep. LA-UR- 05-4983, LANL.