

HERRAMIENTAS DE SOFTWARE LIBRE EN NEUTRÓNICA COMPUTACIONAL: SINTAXIS Y USO DE OPENMC - INTRODUCCIÓN Y DEFINICIÓN DE MATERIALES.

J.I. Márquez Damián

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo

- OpenMC es un código de transporte de radiación (por ahora, sólo neutrones) por el método Monte Carlo, que permite hacer cálculos para fuente fija y cálculos de criticidad en geometrías arbitrarias con secciones eficaces multigrupo o continuas en energía.
- OpenMC está implementado en FORTRAN y utiliza como input un conjunto de archivos de texto en formato XML. Estos archivos pueden generarse a mano o mediante un API en Python.

Desde un punto de vista conceptual, una simulación neutrónica por Monte Carlo requiere la definición de los siguientes parámetros:

- Definición de la geometría, tanto para establecer los límites de la simulación como para asignar materiales en forma unívoca.
- Definición de los materiales con los que se llena la geometría.
- Definición de las condiciones de contorno.
- Definición de los parámetros de ejecución, ya sea para el cálculo de fuente fija como el cálculo de autovalores.

En OpenMC estos parámetros se expresan en forma de archivos XML que se generan con un API en Python.

Invocar el comando de ejecución de OpenMC sin ningún parámetro en un directorio vacío produce el siguiente mensaje de error:

```
1 > openmc
2 ERROR: Settings XML file 'settings.xml' does not exist! In order to run OpenMC,
3     you first need a set of input files; at a minimum, this includes
4     settings.xml, geometry.xml, and materials.xml. Please consult the user's
5     guide at http://mit-crp.github.io/openmc for further information.
6 ERROR STOP.
```

Los nombres de los archivos de entrada de OpenMC son:

settings.xml	Parámetros de ejecución
geometry.xml	Definición de la geometría
materials.xml	Definición de los materiales
plots.xml	Definición de plots (opcional, necesario para invocar <code>openmc -p</code>)

Además es necesario indicarle la ubicación del archivo `cross_sections.xml`, ya sea dentro del archivo `materials.xml` o mediante la variable de entorno `OPENMC_CROSS_SECTIONS`. La salida es un archivo `tallies.out` con resultados de los tallies en formato de texto y archivos en binarios en formato HDF5 (`summary.h5`, `statepoint.hdf5`) que contienen los resultados de la simulación.

- Para realizar la simulación debemos proveer a OpenMC la composición de los distintos materiales que se utilizarán en la simulación.
- OpenMC luego carga bibliotecas de secciones eficaces microscópicas para cada una de las reacciones y nucleidos del sistema. Combinando estas secciones eficaces microscópicas con las densidades numéricas que se calculan en base a las composiciones provistas por el usuario, se calculan las secciones eficaces macroscópicas que se utilizan en el cálculo.
- Estas bibliotecas utilizadas tienen una dependencia continua en energía y tienen un formato propio: son archivos binarios en formato HDF5. Pero, pueden generarse fácilmente a partir de bibliotecas en formato ACE (el formato utilizado por MCNP y Serpent).

Ejemplos de definición de materiales.

`Materiales.ipynb`