



Método de Monte Carlo en el transporte de partículas

FACULTAD DE FÍSICA, PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

PROFESOR: EDGARDO DÖRNER

CURSO: FÍSICA COMPUTACIONAL (FIZ1431)

FECHA DE ENTREGA: 28 DE NOVIEMBRE DEL 2018

ALUMNOS: MICHAEL HAACKE, VICENTE SALINAS

Resumen: El transporte de partículas es clave en muchas aplicaciones hoy en día. Y las metodologías más utilizadas para realizar simulaciones de este tipo corresponden a los métodos de Monte Carlo. En este trabajo, utilizamos este mismo enfoque para simular el transporte de partículas emanadas de un núcleo cubierto de cascarones esféricos concéntricos con el objetivo de obtener la probabilidad de absorción y transmisión junto con sus incertidumbres asociadas. Se obtuvo que en el mejor de los casos, $0,95464 \pm 0,00007$ de las partículas logran escapar la geometría, de modo que el modelo está funcionando como esperaríamos. Además, al aumentar el número de historias, como es de esperar, el error disminuye, de modo que al aumentar en un orden de 10^2 el número de historias, el error disminuye en un factor de 10.

Índice

1. Introducción	1
2. Métodos y Datos	2
2.1. Creación de los datos	2
2.2. Método de análisis	3
3. Resultados	3
4. Discusión	4
5. Conclusiones	4

1. Introducción

Los métodos de Monte Carlo (MC) actualmente forman parte de los métodos más utilizados en simulaciones debido a ser simples y eficientes, capaces de reducir la complejidad de modelos de sistemas físicos como en el caso de problemas de transporte de partículas (Kroese et al. 2014), siendo la simulación de transporte de neutrones la primera aplicación que se le dio a los métodos MC (N. Metropolis 1987) con el fin de simular "historias" de neutrones emanadas de un núcleo esférico de material fisionable rodeado por un cascarón de material moderador. Hoy en día se siguen utilizando métodos MC para simulaciones de transporte de partículas, por ejemplo, el transporte de fotones a través de tejido biológico, una complicada estructura de distintas capas con absorción y dispersión (V. V. Tuchin. 2007).

Los métodos MC se basan en la generación de objetos o procesos aleatorios, muestreando a partir de alguna distri-

bución de probabilidad con la idea de repetir el experimento muchas veces para obtener resultados de interés usando la ley de los grandes números (Kroese et al. 2014). Por esto los métodos MC necesitan correr por un tiempo largo para producir incertidumbres pequeñas.

En este trabajo haremos uso de un modelo de Monte Carlo para estimar la probabilidad de transmisión y absorción de partículas emanadas uniformemente de un núcleo esférico de material fisionable, con una dirección inicial aleatoria, las cuales atraviesan una serie de cascarones esféricos de material moderador concéntricos con el núcleo (ver Figura 1). Además, se considerará un modelo monoenergético con solo absorción y dispersión.

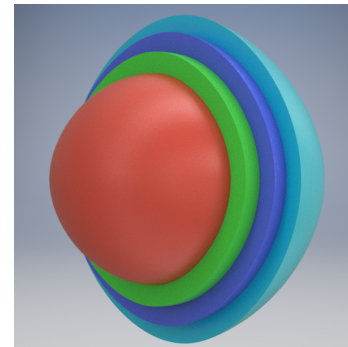


Figura 1: Esquema del núcleo esférico con sus cascarones.

2. Métodos y Datos

2.1. Creacion de los datos

Para la obtención de números pseudo-aleatorios se utilizo un generador del estilo de "generadores lineales congruenciales". En este, se produce una serie de enteros x_n , con $n \in \mathbb{N}$, de modo que

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \bmod m \quad (1)$$

donde a , c y m son enteros positivos tales que $0 \leq a$ y $c < m$. Luego, para obtener un numero entre 0 y 1, se obtiene la siguiente función de probabilidad:

$$r_n = 1 - \frac{x_n}{m} \in (0, 1] \quad (2)$$

Las elecciones para los valores de las constantes corresponden a: $a = 1664525$, $c = 1013904223$, $m = 2^{32}$, y se utilizó una semilla de $x_0 = 0$. Estos valores fueron obtenidos a partir de valores recomendados en William H., et al. (1988).

Ahora, dado que estamos tratando con un modelo mono-energético con sólo absorción y dispersión, la sección eficaz macroscópica total corresponde a $\Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_a$, donde Σ_s corresponde con los procesos de dispersión, y Σ_a con la absorción, de modo que las probabilidades de absorción y dispersión son $\frac{\Sigma_a}{\Sigma_t}$ y $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$, respectivamente. Los valores utilizados para las secciones eficaces y espesores de los cascarones y el núcleo se encuentran en la tabla de la figura 2 a continuación.

Región	$\Sigma_t(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_a(\text{cm}^{-1})$	Espesor (cm)
Núcleo	0.05	0.005	0.50
Cascarón 1	0.1	0.01	0.10
Cascarón 2	10.0	0.1	0.10
Cascarón 3	100.0	10.0	0.10

Figura 2: Tabla con los datos de cada región del problema.

Por otra parte, los procesos estocásticos que deben ser considerados corresponden a:

1. Distancia que alcanza a recorrer una partícula hasta su siguiente punto de interacción.
2. Tipo de interacción (absorción o dispersión).
3. En caso de una interacción de dispersión, el ángulo de dispersión.

En el caso del primer punto, es necesario conocer la probabilidad de que una partícula recorra una distancia r . De física de partículas sabemos que la probabilidad de no sufrir colisiones en una distancia r es $e^{-\Sigma_t r}$ y la probabilidad de una colisión en dr es $\Sigma_t dr$ (Haghighat, Alireza. 2015). De modo que la probabilidad del efecto combinado es

$$p(r)dr = \Sigma_t e^{-\Sigma_t r} \quad (3)$$

Ahora, si η es un número pseudo-aleatorio que resulta de usar la ecuación (2), entonces

$$P(r) = \int_0^r dr' \Sigma_t e^{-\Sigma_t r'} = \eta \quad (4)$$

y el camino libre resulta

$$r = -\frac{1}{\Sigma_t} \log(\eta) \quad (5)$$

Luego de esto hay que considerar si la partícula se dispersa o es absorbida en el medio. Para esto, usando otro número aleatorio η generado con la misma formula (2), si $\eta \leq \Sigma_a/\Sigma_t$, la partícula será absorbida y en caso contrario esta será dispersada.

Ahora, llegando al punto tres, si la partícula es dispersada, hay que encontrar el ángulo de dispersión. Para esto usamos los resultados expuestos en Haghighat, Alireza. 2015 para una dispersión isotrópica. De este modo, podemos muestrear los ángulos de dispersión mediante las formulas

$$\theta_0 = \arccos(2\eta_1 - 1) \quad (6)$$

$$\phi_0 = 2\pi\eta_2 \quad (7)$$

donde η_1 y η_2 son dos números pseudo aleatorios obtenidos mediante la ecuacion (2). Luego calculamos la nueva dirección de la partícula. Si u , v , y w son los vectores directores originales en x , y , y z respectivamente, entonces, en caso de que el cambio en el ángulo polar sea muy pequeño, entonces las nuevas direcciones serán

$$u' = \sin(\theta_0)\cos(\phi_0) \quad (8)$$

$$v' = \sin(\theta_0)\sin(\phi_0) \quad (9)$$

$$w' = w \cos(\theta_0) \quad (10)$$

Y, en caso que no se así, las nuevas direcciones estarán da-

das por

$$u' = (w \frac{u}{s}) \sin(\theta_0) \cos(\phi_0) - (\frac{v}{s}) \sin(\theta_0) \sin(\phi_0) + u \cos(\theta_0) \quad (11)$$

$$v' = (\frac{wv}{s}) \sin(\theta_0) \cos(\phi_0) + (\frac{u}{s}) \sin(\theta_0) \sin(\phi_0) + v \cos(\theta_0) \quad (12)$$

$$w' = -s \sin(\theta_0) \cos(\phi_0) + w \cos(\theta_0) \quad (13)$$

donde $s = \sqrt{1 - w^2}$.

También hay que considerar el caso en que la partícula cambie de cascarón. En este caso lo que se hace es calcular el punto en que la partícula llega al borde de la nueva región, y luego volver a calcular el camino libre medio en la nueva región. Para esto lo que se hace es definir la recta que intersecta un punto entre dos regiones, de modo que

$$\vec{y} = \hat{x}_R n + \vec{x}_i \quad (14)$$

donde \hat{x}_R es el vector en la dirección de la partícula, n es algún número positivo, y x_i es la posición inicial desde donde comienza la partícula (ver Figura 3).

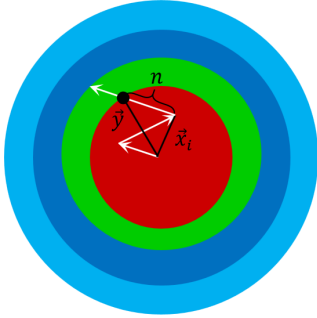


Figura 3: Esquema que representa el caso de una partícula que cambia de región. En color blanco se representan las trayectorias de las partículas.

Ahora, para obtener el punto de intersección se necesita conocer el valor de n . Para esto se resuelve la ecuación $|\vec{y}|^2 = r^2$, de modo que se obtiene

$$n^2 + 2n\hat{x}_R \cdot \vec{x}_i + \vec{x}_i^2 - r^2 = 0 \quad (15)$$

y como n es positivo, tenemos que

$$n = -\hat{x}_R \cdot \vec{x}_i + \sqrt{(\hat{x}_R \cdot \vec{x}_i)^2 - \vec{x}_i^2 + r^2} \quad (16)$$

Luego simplemente reemplazamos n en la ecuación (6) para obtener \vec{y} .

En la Figura 4 a continuación se tiene un ejemplo de como se ve una historia simulada mediante el procedimiento descrito anteriormente:

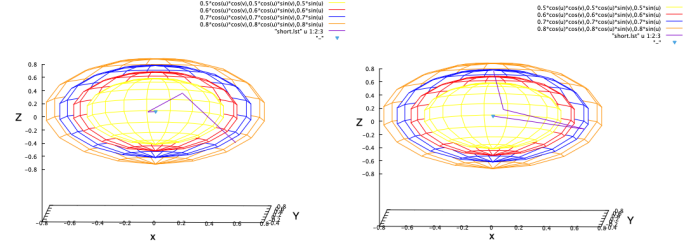


Figura 4: Ejemplos de historias de las partículas simuladas.

2.2. Método de análisis

Para asignarle un error probable a los resultados del cálculo con MC, se llevo a cabo el siguiente procedimiento: Si el cálculo llama N historias de partículas, entonces dividimos estas historias en n grupos estadísticos o batches, que contienen N/n historias cada uno. Luego, si la cantidad calculada es x_i , se obtiene el promedio

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (17)$$

Y luego, obtenemos la varianza,

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \quad (18)$$

con lo que podemos obtener el error del promedio mediante

$$s_{\bar{x}}^2 = \frac{s_x^2}{n} \quad (19)$$

Para esto se asume que los x_i están distribuidos de forma normal alrededor de \bar{x} .

Entonces, se llevo a cabo este procedimiento para encontrar las probabilidades de absorción y transmisión junto con sus incertidumbres usando las ecuaciones (17) y (19). Para esto se utilizó una cantidad de batches de $n = 10$ y se hizo para 1000, 100000, y 10000000 historias.

3. Resultados

A continuación en la Figura 5 se tiene una tabla que contiene todos los resultados obtenidos en lo que respecta a las probabilidades de absorción y transmisión de las partículas:

Histo- rias	Prob. Abs en el Núcleo	Prob. de Absorción	Prob. de Transmisión
1000	0.02400 ± 0.00581	0.04400 ± 0.00680	0.95600 ± 0.00653
100000	0.02687 ± 0.00061	0.04467 ± 0.00082	0.95533 ± 0.00069
10^7	0.02671 ± 0.00005	0.04536 ± 0.00007	0.95464 ± 0.00007

Figura 5: *Resultados de las probabilidades de absorción y transmisión. La probabilidad de absorción en el núcleo se refiere a la probabilidad de que una partícula sea absorbida dentro del núcleo. Nótese como el error asociado disminuye al aumentar el número de historias.*

4. Discusión

Gracias a la simulación MonteCarlo se pudo observar que el $\approx 95\%$ de las partículas logran escapar la geometría, esto nos permite determinar que el modelo esta funcionando como esperamos, también notamos que el error decrece al aumentar en un orden de 10^2 el número de historias, de modo que el error disminuye en un factor de 10

También notamos que se podría encontrar óptimos dependiendo lo que se quiere logra, por ejemplo si se quiere obtener la mayor tasa de captura en el núcleo como seria de interés en una bomba nuclear, donde los neutrones serian las partículas y para una explosión mas intensa se requiere que la mayoría de los neutrones sean reabsorbido en el núcleo.

5. Conclusiones

Se pudo lograr crear una simulación de Montecarlos que permita representar la realidad con un nivel de precisión adecuado para poder determinar como se comportaría una emisión de partículas en una geometría esférica en un tiempo y gasto de recursos razonable.

Con los parámetros usados el $0,95464 \pm 0,00007\%$ de las partículas se dispersan al ambiente y un $0,02671 \pm 0,00005\%$ de las partículas son absorbida en el núcleo, finalmente el $0,04536 \pm 0,00007\%$ son absorbida en toda la geometría.

Referencias

- Kroese, D. P.; Brereton, T.; Taimre, T.; Botev, Z. I. (2014). "Why the Monte Carlo method is so important today". *WIREs Comput Stat.* 6 (6): 386–392. doi:10.1002/wics.1314.
- N. Metropolis. The beginning of the Monte Carlo method. *Los Alamos Science*, 15:125–130, 1987.
- V. V. Tuchin. *Tissue Optics: Light Scattering Methods and Instruments for Medical Diagnosis*. SPIE Press, Bellingham, second edition, 2007.
- Press, William H., et al. "Numerical recipes in C." Cambridge University Press 1 (1988).
- Haghighat, Alireza. (2015) Fixed-Source Monte Carlo ParticleTransport. *Monte Carlo Methods for Particle Transport*.